



**Etude microscopique de systèmes fermioniques finis :
corrélations dans les noyaux atomiques et gaz
d'électrons confinés par un potentiel harmonique en
présence d'un champ magnétique**

Houda Naidja

► **To cite this version:**

Houda Naidja. Etude microscopique de systèmes fermioniques finis : corrélations dans les noyaux atomiques et gaz d'électrons confinés par un potentiel harmonique en présence d'un champ magnétique. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2009. Français. NNT : . tel-00404558

HAL Id: tel-00404558

<https://theses.hal.science/tel-00404558>

Submitted on 16 Jul 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DE

SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par Mlle HOUDA NAÏDJA

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE NUCLÉAIRE

ÉTUDE MICROSCOPIQUE DE SYSTÈMES FERMIONIQUES FINIS :
CORRÉLATIONS DANS LES NOYAUX ATOMIQUES

ET

GAZ D'ÉLECTRONS CONFINÉS PAR UN POTENTIEL HARMONIQUE
EN PRÉSENCE D'UN CHAMP MAGNÉTIQUE

Soutenue le 09 Janvier 2009

Après avis de MM.

J. Bartel

J.-F. Berger

Rapporteurs

Devant la commission d'examen formée de :

M. J. Labarsouque, Professeur, Université Bordeaux 1

Président

MM. J. Bartel, Maître de Conférences, IPHC Strasbourg
K. Bencheikh, Professeur, Université de Sétif (Algérie)
M. Bender, Directeur de Recherches, CENBG Bordeaux
J.-F. Berger, Physicien, CEA Bruyères-le-Châtel
P. Quentin, Professeur, Université Bordeaux 1

Examineurs

REMERCIEMENT

Je voudrais tout d’abord dédier ce travail, à la mémoire de *D. Samsoen*. J’ai fait tout mon possible pour que ce travail se déroule comme s’il était toujours avec nous.

Mes plus vifs remerciements s’adressent avant tout à mon professeur et mon directeur de thèse *P. Quentin*, d’avoir non seulement dirigé cette thèse, ou de sa patience lors des corrections mais surtout du sujet qui m’a proposé “HTDA”. Ensemble, on a su comment passer les moments de bonheur et de malheur, de haut et de bas, pour arriver à la fin.

J’associe à mes remerciements *K. Bencheikh* d’avoir dirigé la deuxième partie de cette thèse, sur un sujet qu’il a proposé.

Je suis aussi très reconnaissante envers *J. Bartel*, pour avoir non seulement accepter de rapporter sur ce travail, mais aussi pour ses corrections rigoureuses qui ont permis d’améliorer la présentation du manuscrit, pour des discussions sur les sujets qu’on a abordé ensemble par téléphone ou e-mail sur la thèse et le code HTDA.

Ma profonde reconnaissance s’adressent également à *J. F. Berger* pour l’honneur qu’il m’a fait d’avoir accepté d’être rapporteur de cette thèse, ainsi que pour ses nombreuses remarques, suggestions, surtout pour l’intérêt qu’il a porté à mes travaux.

Je ne sais comment exprimer ma gratitude envers *M. Bender*, qui m’a prouvé son soutien, son encouragement et son aide à des moments très durs.

Je remercie *J. Labarsouque* d’avoir présidé le jury, et pour les remarques qu’il a formulé lors de sa lecture du manuscrit.

Je tiens aussi à mentionner le plaisir que j’ai eu à travailler au sein du CENBG, et j’en remercie aussi tous les membres.

Je ne saurais oublier ma chère famille “Naïdja”. Grâce à eux, j’ai pu affronter toutes les difficultés et les problèmes rencontrés au long de cette expérience. Mes chaleureux remerciements à mes très chers parents *Salah* et *Akila* pour leurs prières et conseils, ainsi qu’à mes soeurs (*Izdihar*, *Nadjoua*, *Ilhem*, *Nihed* et *Chahra*), ma tante *Djamila* et mon frère *Madjid* de leur soutien et leurs encouragements. Ils étaient très loin de moi, mais ils seront toujours tout près de mon cœur.

Table des matières

Introduction	1
I LES CORRÉLATIONS AU DELÀ DU CHAMP MOYEN	3
1 L'APPROXIMATION DE HARTREE-FOCK	5
1.1 Approximation de particules indépendantes	5
1.2 L'approche de Hartree-Fock	6
1.2.1 Le principe variationnel	7
1.2.2 Les équations de Hartree-Fock	8
1.3 Le choix de l'interaction	11
1.3.1 Interaction effective microscopique	12
1.3.2 Interaction effective phénoménologique	12
1.4 La fonctionnelle d'énergie	14
1.5 Hartree-Fock et brisures de symétries	16
2 LES CORRÉLATIONS D'APPARIEMENT	17
2.1 L'Approximation BCS	18
2.1.1 L'approche de Bardeen, Cooper et Schrieffer et l'appariement . . .	18
2.1.2 La transformation de Bogoliubov	18
2.1.3 La fonction d'onde de BCS	19
2.2 L'Approche HTDA	21
2.2.1 Le principe de l'approche HTDA	21
2.2.2 Le formalisme HTDA	22
2.2.3 La construction de la base $ npnh\rangle$	25
2.2.4 Les troncations dans l'approche HTDA	26
2.2.5 La symétrie par rapport au renversement du temps	27
2.2.6 L'interaction delta	29
2.2.7 Les éléments de matrice du Hamiltonien	30
2.2.8 Diagonalisation	32
2.2.9 Mesure de la diffusivité de la surface de Fermi	34
2.2.10 La valeur moyenne des opérateurs à un corps	34
2.2.11 Calcul auto-cohérent	35

3	LES CORRÉLATIONS VIBRATIONNELLES	37
3.1	Historique	37
3.2	Les résonances géantes	38
3.2.1	La résonance dipolaire $E1$	38
3.2.2	La résonance quadrupolaire $E2$	39
3.2.3	La résonance monopolaire $E0$	39
3.3	Les règles de somme	40
3.4	L'évaluation des moments m_k	42
3.5	L'énergie et la largeur des résonances	43
3.6	Le formalisme RPA	44
3.7	Le couplage neutron-proton et l'isospin	46
3.8	L'interaction quadrupole-quadrupole	47
3.9	La construction de la base $ (n\pi nh)_\nu(m\pi mh)_\pi\rangle$	48
3.10	Les éléments de la matrice du Hamiltonien	49
3.10.1	Les éléments diagonaux	51
3.10.2	Les éléments non diagonaux	51
3.11	Diagonalisation	52
3.12	Les moments dans le cadre de l'approche HTDA	53
4	APPLICATIONS ET RÉSULTATS	55
4.1	Aspects numériques	55
4.2	Traitement des corrélations vibrationnelles dans le cas du ^{40}Ca	56
4.2.1	L'intensité de l'interaction quadrupole-quadrupole	57
4.2.2	La taille de la grande fenêtre X_{QQ}	58
4.2.3	Les états excités	61
4.2.4	Nombre d'itérations dans la procédure de diagonalisation à la Lanczos	63
4.2.5	Les propriétés calculées de la résonance géante quadrupolaire isoscalaire	63
4.2.6	Conclusions	69
4.3	Traitement des corrélations d'appariement et des corrélations vibrationnelles dans le cas du ^{40}Ca	69
4.3.1	L'effet de l'intensité de l'interaction quadrupole-quadrupole	70
4.3.2	Les propriétés de la résonance géante quadrupolaire isoscalaire	71
4.3.3	Effet des corrélations d'appariement neutron-proton	76
4.3.4	Conclusions	85
II	SYSTÈME DE FERMIONS PIÉGÉS PAR UN POTENTIEL HARMONIQUE EN PRÉSENCE D'UN CHAMP MAGNÉTIQUE UNIFORME	87
5	ÉTUDE D'UN GAZ DE FERMIONS	89
5.1	Le Hamiltonien du système	90
5.2	La matrice densité de Bloch	91
5.3	Calcul de la matrice densité	92
5.4	La densité dans l'espace de Fourier	96

5.5	La densité de courant	99
5.6	Conclusions	100
Conclusions et Perspectives		103
Annexes		104
A	La seconde quantification et Théorème de Wick	107
A.1	Les opérateurs de création et d'annihilation	107
A.2	Relations d'anticommutation	107
A.3	Opérateur nombre de particules	108
A.4	Opérateur à un et deux corps	108
A.5	Produits normaux, Contractions et Théorème de Wick	109
A.6	Quasi-contractions et généralisation du théorème de Wick faible	110
B	La B.O.H.S.A	111
B.1	La troncation de la B.O.H.S.A	111
C	Les éléments de matrice de l'interaction delta	113
C.1	La décomposition des états HF sur la B.O.H.S.A	113
C.2	Le canal $S=0$, $T=1$	114
C.3	Le canal $S=1$, $T=0$	115
D	La calcul détaillé des éléments de la matrice de l'interaction V_{res}	117
D.1	Sans corrélations neutron-proton	117
D.1.1	entre deux états identiques	118
D.1.2	entre deux états qui diffèrent par une particule	119
D.1.3	entre deux états qui diffèrent par deux particules	120
D.2	Avec corrélations neutron-proton	120
D.2.1	entre deux états identiques	121
D.2.2	entre deux états qui diffèrent par une particule	123
D.2.3	entre deux états qui diffèrent par deux particules	123
E	Le moment Quadrupolaire	125
E.1	Opérateur moment quadrupolaire	125
E.2	L'opérateur quadrupolaire exprimé en fonction d'opérateurs de création et d'annihilation	126
E.3	Les éléments de matrice de l'opérateur quadrupolaire	127
E.4	L'invariance de l'interaction $\hat{Q}\hat{Q}$ par rotation	129
E.5	Calcul des règles de somme d'ordre $k = 1$	129
E.5.1	Les cas monopole et quadrupole	129

F	Le calcul détaillé de quelques propriétés d'un gaz de Fermions	131
F.1	Calcul de $C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$	131
F.2	Calcul de $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$	134
F.3	Calcul de $\vec{J}(\vec{r})$	135
F.4	Calcul de $n(\vec{k})$	136
F.5	Calcul du nombre de particules	138
 Bibliographie		 141

Table des figures

1.1	<i>Représentation schématique du vide de Hartree-Fock pour un état de charge (en supposant la dégénérescence de Kramers).</i>	11
2.1	<i>Différentes excitations $n\text{pnh}\rangle$.</i>	27
3.1	<i>Les différentes résonances multipolaires</i>	40
3.2	<i>Représentation schématique de la RGQIS, où la distribution des nucléons induit un changement de la forme du noyau.</i>	41
3.3	<i>Illustration de différents couplages entre deux nucléons. Les cercles blancs représentent les protons et les cercles noirs représentent les neutrons, et les flèches décrivent les spins.</i>	46
3.4	<i>Les différentes excitations particule-trou tenues compte dans le traitement des corrélations vibrationnelles et appariement.</i>	50
4.1	<i>Variation de l'énergie de corrélation de l'état fondamental en fonction du paramètre α de l'intensité de la force QQ, pour les paramétrisations SIII et SkM^*.</i>	58
4.2	<i>Probabilités d'occupation de différentes configurations $(n\text{pnh})_\nu(m\text{pmh})_\pi\rangle$ notées $nm = (00, 10, 01, 11)$ calculées le cas de l'interaction SkM^*, en fonction du paramètre α de l'intensité de la force QQ.</i>	59
4.3	<i>Contributions des différents états excités au moment d'ordre $k = 1$ pour différentes valeurs du paramètre α de l'intensité de la force QQ dans le cas de SkM^* avec la troncation sur les états HF $X_{QQ} = 40$ MeV.</i>	60
4.4	<i>Moment m_0 (NEWSR) en fonction du paramètre de troncation sur les états à une particule, calculé avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3}$ MeV.fm⁻⁴ de la force QQ.</i>	61
4.5	<i>Moment m_1 (EWSR) en fonction du paramètre de troncation sur les états à une particule, calculé avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3}$ MeV.fm⁻⁴ de la force QQ.</i>	62
4.6	<i>Contributions des différents états excités au moment d'ordre 1, pour différentes valeurs de troncations sur les états à une particule, le cas d'une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3}$ MeV.fm⁻⁴ de la force QQ.</i>	62
4.7	<i>Convergence des énergies E_1, \bar{E}, E_3 dans le ^{40}Ca, par rapport à l'énergie d'excitation maximum E_n, des états excités considérés dans leurs calculs, avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3}$ MeV.fm⁻⁴ de la force QQ.</i>	63

4.8	Convergence des moments m_0, m_1 et m_3 en fonction de l'énergie d'excitation maximale retenue, avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ	64
4.9	Effet du paramètre Nloop (nombre d'itérations de Lanczos) sur la fonction d'excitation de la RGQIS, avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ	65
4.10	Convolution gaussienne de la fonction d'excitation dans le cas d'un calcul avec 900 itérations (la largeur de convolution est de 0.5 MeV) et dans le cas d'un calcul avec 100 itérations (la largeur est de 0.5 MeV), avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ	65
4.11	Fonction d'excitation pour le cas du ^{40}Ca dans les deux cas des paramétrisations SIII et SkM*, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ	67
4.12	Convolution gaussienne (de largeur 0.5 MeV) de la fonction d'excitation du ^{40}Ca , dans le cas des deux forces SIII et SkM*, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ	68
4.13	Énergies \bar{E} et E_3 de la RGQIS, calculées dans le cadre HTDA, comparées à l'expérience et aux deux estimations systématiques ($E = 60, 65A^{-1/3}$) MeV. La force SkM* et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ ont été utilisées.	68
4.14	Variation de l'énergie de corrélation du fondamental, en fonction du paramètre α de l'intensité de la force QQ , dans les différents cas d'interactions résiduelles : δ , QQ , leurs sommes traitées séparément δQQ , et simultanément $\delta + QQ$ avec une intensité d'appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$	72
4.15	Probabilités d'occupation de différentes configurations ($n m$), en fonction du paramètre α l'intensité de la force QQ , dans le cas de l'interaction résiduelle $\delta + QQ$, avec une intensité d'appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$	73
4.16	Comparaison de la probabilité d'occupation du vide (00) et des états d'excitation (11) dans les deux cas d'interactions résiduelles ($\delta + QQ$ et QQ) avec une intensité d'appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$	73
4.17	Fonction d'excitation du ^{40}Ca calculée dans le cadre HTDA avec l'interaction résiduelle $\delta + QQ$, pour différentes valeurs du paramètre α de la force QQ , et avec une intensité d'appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$	74
4.18	Sur cette Figure nous avons reporté les résultats de la figure 4.17 obtenus avec une interaction ($\delta + QQ$) avec ceux obtenus sans interaction δ (interaction QQ seule). L'intensité d'appariement dans ce cas est $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$	75
4.19	Variation de l'énergie E_3 de la RGQIS du ^{40}Ca en fonction du paramètre de l'intensité de l'interaction QQ dans les deux cas d'interaction résiduelle (QQ et $\delta + QQ$). L'intensité d'appariement est $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$	76
4.20	Différence entre le moment d'ordre $k = 1$ pour deux valeurs de convergence à la Lanczos 900 et 500, pour le même nombre d'états excités (500), avec les intensités $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ et $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$ des deux forces QQ et δ respectivement.	77

4.21	<i>Énergie de corrélation du fondamental en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur $V_0^{T=1}$ (identiques pour les paires $(\nu\nu), (\pi\pi)$ ou $(\nu\pi)$), pour différentes valeurs du paramètre de l'intensité de l'interaction QQ.</i>	78
4.22	<i>Variation de la probabilité d'occupation du vide (00) en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur, pour différentes valeurs du paramètre α de l'intensités de la force QQ.</i>	79
4.23	<i>Les probabilités des états de type $(nm) = (11), (20), (02), (22)$ en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur $V_0^{T=1}$, pour différentes valeurs du paramètre α de la force QQ.</i>	80
4.24	<i>Figure analogue à la Figure 4.23, pour l'énergie E_3 de la RGQIS en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur $V_0^{T=1}$, (identiques pour les paires $(\nu\nu), (\pi\pi)$ ou $(\nu\pi)$), pour différentes intensités de l'interaction QQ</i>	81
4.25	<i>Fonction d'excitation pour différentes intensités d'appariement $V_0^{T=1}$, dans le cas d'une intensité $V_2^{QQ} = -40A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ.</i>	82
4.26	<i>Variation de l'énergie de corrélation en fonction du paramètre X, rapport entre les deux intensités $V_0^{T=0}$ et $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, pour deux valeurs de l'intensité de la force QQ.</i>	82
4.27	<i>Probabilité d'occupation du vide en fonction du paramètre X (voir légende figure 4.26), avec une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, et pour deux cas d'intensités de la force QQ.</i>	83
4.28	<i>Variation de la probabilité d'occupation des états $(nm) = (11), (20), (02)$ en fonction du paramètre X (voir légende figure 4.26), avec une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, et pour deux cas d'intensités de la force QQ. . . .</i>	83
4.29	<i>Variation de l'énergie de la RGQIS en fonction du paramètre X, régulant le rapport des intensités isoscalaire et isovecteur (voir légende figure 4.26), avec une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, et pour une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ.</i>	84
5.1	<i>Densité spatiale de $N=110$ fermions pour différentes intensités du champ magnétique.</i>	93
5.2	<i>Densité spatiale exacte pour $N=110$ fermions comparée avec celle de TF. .</i>	94
5.3	<i>Densité spatiale exacte pour $N=380$ fermions comparée avec celle de TF. .</i>	95
5.4	<i>Densité spatiale exacte pour $N=1260$ fermions comparée avec celle de TF. .</i>	95
5.5	<i>Profil de densité dans l'espace de Fourier pour $N=240$ particules, et sans champ magnétique ($\omega = 0$).</i>	99
5.6	<i>Le profil de densité dans l'espace de Fourier pour $N=110$ particules, et pour différentes intensités du champ magnétique $\omega = 0, 0.45, 0.70$.</i>	100

Liste des tableaux

1.1	<i>Paramètres des deux interactions de Skyrme que nous avons utilisées. . . .</i>	14
4.1	<i>Nombre total des états d'excitation de type $(nm)=(10),(01)$ et (11) dans le noyau ^{40}Ca pour une fenêtre de taille $X_{QQ} = \pm 40 \text{ MeV}$</i>	57
4.2	<i>Variations de la probabilité d'occupation (%) de différentes configurations (nm) en fonction du paramètre d'intensité quadrupolaire α.</i>	59
4.3	<i>Énergies E_k, largeurs, et pourcentages des règles de somme de l'excitation quadrupolaire du ^{40}Ca, avec les deux paramétrisations <i>SIII</i> et <i>SkM*</i>, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ, comparés à l'expérience et aux résultats d'autres théories.</i>	67
4.4	<i>Masse effective calculée avec les énergies E_1, \bar{E} et E_3 pour les deux paramétrisations <i>SkM*</i> et <i>SIII</i>, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ, comparée à ce qu'on obtient dans la matière nucléaire infinie.</i>	67
4.5	<i>Probabilités d'occupation des états à N particules notés $(n m)$, pour différentes intensités de la force quadrupole-quadrupole, en présence d'une interaction δ d'intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.</i>	72
4.6	<i>Énergies \bar{E}, E_3, largeurs et pourcentages, dans les deux cas d'interaction résiduelle $\delta + QQ$ et QQ pour différentes intensités V_2^{QQ} de la force QQ et une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$ de la force δ.</i>	74
4.7	<i>Probabilité d'occupation de différente composition de l'état fondamental pour une intensité $V_2^{QQ} = -40A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ, et une intensité d'appariement fixe $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.</i>	80

INTRODUCTION

Des progrès très significatifs dans la compréhension de la structure des noyaux stables ou exotiques, ont été réalisés au cours de ces dernières années, dans le cadre des modèles microscopiques : le modèle en couches ou la théorie du champ moyen, notamment en tenant compte des corrélations au delà de l'approximation simple de Hartree-Fock (HF). Ceci a permis une bonne description de la structure de la plupart des noyaux connus expérimentalement, et de développer et approfondir des approches et des modèles théoriques en physique nucléaire.

Une classe importante de ces corrélations sont les corrélations d'appariement, où les nucléons dans des états conjugués par renversement du sens du temps forment des paires couplées par une interaction attractive. Ce type de corrélations est beaucoup plus important dans le cas des noyaux situés en milieu de couches. En général, elles sont traitées dans le cadre de l'approximation BCS ou HFB, mais la non conservation du nombre de particules dans ces approches constitue un défaut majeur. Les techniques de restauration (comme les méthodes de projections) approchées sont insuffisantes pour décrire les situations de faible appariement.

Une deuxième classe de corrélations est constituée par les corrélations vibrationnelles, qui viennent du couplage du mouvement d'un nucléon aux oscillations collectives, comme par exemple les résonances géantes qui sont le résultat de telles excitations collectives des nucléons. Elles sont souvent décrites au niveau théorique dans le cadre de la RPA (Random Phase Approximation). Mais cette approche souffre en particulier de la violation du principe de Pauli, à cause de l'approximation quasi-bosonique.

Ces deux types de corrélations d'appariement et vibrationnelles sont importantes non seulement dans l'étude de la structure des noyaux, mais elles fournissent aussi des éléments pour mieux comprendre les interactions effectives susceptible de décrire tous les types de corrélations. À cet effet, une approximation appelée Higher Tamm Dancoff Approximation notée HTDA a été développée par le groupe de physique théorique du CENBG (Centre d'Études Nucléaire à Bordeaux) pour traiter les corrélations, jusqu'à présent d'appariement, dans le fondamental avec conservation du nombre de particules. L'inclusion d'une partie des corrélations vibrationnelles dans le cadre de la même approche fut un de nos objectifs essentiels dans cette thèse, en utilisant une interaction schématique réduite, à ce stade, à être une interaction de type delta plus quadrupole-quadrupole, tenant compte en outre des corrélations entre tous types d'états de charge.

Cette thèse préparée en cotutelle entre deux institutions porte sur deux sujets. La première partie a été abordée au CENBG (6 mois/an). Elle est consacrée à l'étude des corrélations au delà du champ moyen, comme l'appariement et les corrélations vibrationnelles qui seront développées dans les chapitres 2 et 3 dans le cadre de l'approximation HTDA. Une présentation théorique de l'approximation Hartree-Fock dans le premier chapitre sera nécessaire, dans la mesure où elle fournit la base de toute approche microscopique partant d'un champ moyen.

Ces chapitres comportent une exposition des outils et des calculs théoriques nécessaires à notre étude. Le développement d'un code numérique HTDA permettant de décrire les corrélations d'appariement et quadrupole, en tenant compte de l'interaction entre neutron-proton a constitué une des phases les plus importantes dans le déroulement de cette thèse. Nous présenterons dans le chapitre 4, les résultats obtenus dans le traitement des corrélations vibrationnelles, avec ou sans appariement dans le cadre HTDA. Ils ont permis de valider notre approche par comparaison avec d'autres résultats théoriques et des données expérimentales. Nous nous sommes limités par manque de temps à l'étude de l'état fondamental et des états excités dans le cadre de notre modèle simple du noyau doublement magique (et sphérique) ^{40}Ca . Les règles de somme se sont avérées être un outil important pour tester notre approche en général, et en particulier pour décrire les propriétés de la résonance géante quadrupole isoscalaire. Enfin, l'effet sur l'état fondamental et les états excités de l'appariement neutron-proton isoscalaire et isovecteur en présence des corrélations quadrupolaires a été abordé.

La seconde partie a été traitée à l'Université de Sétif (Algérie) (4 mois/an), elle porte sur l'étude des propriétés d'un gaz de fermions piégés dans un potentiel d'oscillateur harmonique à 2D, et à température nulle, en présence d'un champ magnétique. Ce travail fait l'objet du dernier chapitre. La matrice densité de Bloch s'avère être un outil important pour effectuer cette étude analytique et numérique. Nous nous sommes essentiellement attachés à détailler le calcul des expressions exactes des grandeurs physique, pour les comparer avec celles obtenues dans le cadre de l'approximation de Thomas-Fermi.

Première partie

LES CORRÉLATIONS AU DELÀ DU CHAMP MOYEN

Chapitre 1

L'APPROXIMATION DE HARTREE-FOCK

Les méthodes microscopiques utilisant l'approximation de champ moyen, ont acquis une remarquable fiabilité comme base de la description des propriétés statiques et dynamiques des noyaux.

Nous empruntons à la physique atomique, une approche de champ moyen non relativiste, celle de Hartree-Fock. Un tel formalisme repose sur l'approximation de particules indépendantes et ne prend en compte que les corrélations de Pauli. Ceci permet de réduire le problème de plusieurs corps en interaction, à une description de particules non interactives dans un champ moyen.

Cependant l'approximation HF dans les noyaux n'est possible qu'à condition d'utiliser une interaction effective qui inclut l'effet très répulsif du cœur dur de la force nucléon-nucléon libre.

Dans ce contexte nous allons présenter les hypothèses, les approximations, et les ingrédients qui entrent dans la construction d'une telle approche.

1.1 Approximation de particules indépendantes

Nous modélisons le noyau comme un système constitué de A nucléons, qui se répartissent en Z protons (noté π) et N neutrons (noté ν). Les hypothèses fondamentales prises en compte sont :

- Le noyau atomique est un système quantique à A corps.
- Les nucléons interagissent par une force à deux corps. On peut considérer que cette limitation est une conséquence pratique du principe d'exclusion de Pauli. Compte tenu de la portée de la force nucléon-nucléon qui est de l'ordre de la taille d'un nucléon, la probabilité que trois nucléons interagissent dans la matière nucléaire simultanément, est considérée comme raisonnablement suffisamment faible pour pouvoir la négliger en première approximation. Cette hypothèse n'est pas complètement vraie, par exemple dans le cas de l'interaction de Skyrme, où l'influence des composantes à trois corps et plus de l'interaction nucléaire est incluse dans un terme à deux corps dépendant de la densité du milieu [7] (*cf.* section 1.3.2).
- Les nucléons sont des objets ponctuels et sans structure.

Ils obéissent à l'équation stationnaire non relativiste de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (1.1)$$

où l'Hamiltonien \hat{H} du système est composé de l'opérateur énergie cinétique \hat{T} et d'une interaction effective à deux corps $\hat{V}^{(2)}$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}^{(2)} = \sum_{i=1,A} \frac{\hat{P}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1,A \\ i \neq j}} \hat{V}(i,j). \quad (1.2)$$

Un des problèmes rencontrés dans les calculs de structure nucléaire est de résoudre l'équation de Schrödinger (1.1), pour un système constitué de A corps, avec A allant de quelques unités à quelques centaines. Pour cela, on est amené à effectuer des approximations. La première d'entre elles consiste à considérer que le système de nucléons peut être décrit en terme de particules indépendantes. Cette approximation est justifiée expérimentalement (*cf.* [1]), par l'existence d'une structure en couches, semblable à celle rencontrée en physique atomique. En particulier, l'énergie de séparation d'un nucléon devient brusquement très grande, pour certains nombres de neutrons et/ou protons : 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, ce qui rend de tels noyaux, appelés magiques, plus fortement liés que la moyenne.

L'idée centrale de l'approche de particules indépendantes, est de considérer que les nucléons dans le noyau évoluent indépendamment les uns des autres, sous l'effet d'un potentiel moyen créé par les nucléons eux mêmes. La grande valeur du libre parcours moyen dans la matière nucléaire saturée, due au principe de Pauli est l'une des justifications de cette approximation. En effet, il en résulte que le nucléon n'interagit pas qu'avec ses proches voisins, mais est capable de ressentir un potentiel moyen attractif, qui l'attire à l'intérieur du noyau. Dans ce cadre approché, on remplace l'équation de Schrödinger (1.2) à A corps par un système couplé de A équations à un corps.

Cette simplification essentielle du problème à A corps, constitue l'hypothèse fondamentale de toutes les approches du type champ moyen, où l'Hamiltonien (1.2) est construit avec une interaction effective qui dépend de la densité. En principe, dans ce cas, comme on va le voir dans ce qui suit, on ne résoud pas l'équation de Schrödinger (1.1), mais on résoud des équations de Schrödinger pour des fonctions d'onde individuelles. L'approximation de Hartree-Fock s'est révélée comme une des plus fructueuses de telles approches.

1.2 L'approche de Hartree-Fock

L'approche de Hartree-Fock (HF) a été développée pour la première fois par *Hartree* en 1928 [2], pour décrire de façon plus précise la structure électronique des atomes, en tenant compte de l'interaction électrostatique à deux corps entre les électrons. Mais dans son évaluation *Hartree* n'a pas inclus les effets du principe de Pauli, *Fock* les a introduit en 1930 [3] par l'antisymétrisation de la relation de *Hartree*. En conséquence, la fonction

d'onde peut être approchée par un produit des fonctions d'ondes individuelles antisymétrisé. L'approche a été mise en œuvre en physique nucléaire pour la première fois en 1963 par *Kelson* [4].

Dans l'approche de HF, la première hypothèse pour résoudre le problème à A corps, est de considérer que l'Hamiltonien de type (1.2) contient un terme d'énergie cinétique et une interaction effective à deux corps comme on vu. La deuxième hypothèse est de considérer que les A particules indépendantes se trouvent dans un champ moyen créé par les particules elles mêmes. L'état du système $|\Psi\rangle$ à A particules qui ne tient pas compte du principe de Pauli, est le produit des états de particules individuelles $|\Phi_i\rangle$,

$$|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot |\Phi_3\rangle \cdots |\Phi_A\rangle.$$

Puisque notre système est fermionique, on doit en plus tenir compte du principe de Pauli, à savoir : l'état d'un système doit être antisymétrique.

On définit l'état «physique» $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$, qui tient compte du principe de Pauli, résultat de l'action de l'opérateur d'antisymétrisation $\hat{\mathcal{A}}$ sur $|\Psi\rangle$

$$|\Psi_{\text{HF}}\rangle = \sqrt{A!} \hat{\mathcal{A}} |\Psi\rangle,$$

où $\sqrt{A!}$ est le facteur de normalisation pour que l'état $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ soit normalisé à 1, et l'antisymétriseur $\hat{\mathcal{A}}$ est tel que

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{A!} \sum_P (-1)^p \hat{P}.$$

La sommation porte sur toutes les permutations P multipliée par une phase égale à la signature de cette permutation, comme étant donnée par $(-1)^p$, où p est le nombre de transpositions, dont le produit est équivalent à p .

Dans ce cas, la fonction d'onde s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater,

$$\Psi_{\text{HF}}(r_1, r_2, \dots, r_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \Phi_1(r_1) & \Phi_1(r_2) & \dots & \Phi_1(r_A) \\ \Phi_2(r_1) & \Phi_2(r_2) & \dots & \Phi_2(r_A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_A(r_1) & \Phi_A(r_2) & \dots & \Phi_A(r_A) \end{vmatrix}. \quad (1.3)$$

où $\Phi_i(r_j)$ est la fonction d'onde d'une particule j dans un état à un corps i .

Cet ansatz est la traduction mathématique de l'hypothèse du modèle à particules indépendantes, tenant compte des corrélations liées au principe de Pauli. Il reste à déterminer les fonctions d'onde individuelles de chaque nucléon intervenant dans ce déterminant de Slater, de même que le potentiel à un corps dérivé à partir de l'interaction effective à deux corps. La méthode utilisée dans ce cas résulte de l'application du principe variationnel approché de Ritz.

1.2.1 Le principe variationnel

Le principe variationnel de Ritz s'énonce ainsi :

«*Tout état physique de norme non nulle qui rend extrémal $E[\Psi]$, est état propre de H avec $E[\Psi]$ pour valeur propre, et réciproquement*»,

où $E[\Psi]$ est la fonctionnelle d'énergie

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$

Par conséquent, la résolution de l'équation de Schrödinger (1.1) est équivalente à l'extrémalisation de la fonctionnelle $E[\Psi]$, donc

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E[\Psi]|\Psi\rangle \iff \delta E[\Psi] = 0.$$

Ces deux propositions équivalentes sont très difficiles à manier dans la pratique, si on les applique exactement. C'est pourquoi on va se limiter pour le calcul variationnel à un sous ensemble des états physiques, d'expression mathématique plus ou moins simple : ce sont les états d'essai. Si la vraie solution n'est pas dans le sous ensemble des états d'essai, la solution extrême n'est pas état propre exact, mais seulement une approximation.

L'approximation de HF est qualifiée de méthode variationnelle approchée, dans laquelle les états $|\Psi\rangle$ sont des déterminants de Slater d'essai, qui forment un sous ensemble de l'espace de Hilbert. L'approche est adaptée à la recherche de l'état fondamental E_0 , qui représente la solution exacte du système, puisque pour tout état d'essai $|\Psi\rangle$ on a :

$$E[\Psi] \geq E_0.$$

où E_0 est la valeur la plus basse d'un calcul variationnel. Donc, il est clair que la qualité de la solution finale du système pour la description de l'énergie du fondamental dépend fortement du choix du sous-ensemble des états d'essai.

1.2.2 Les équations de Hartree-Fock

L'Hamiltonien \hat{H} à A particules de l'équation (1.2) composé d'opérateurs à un et deux corps, s'écrit en seconde quantification (*cf.* les annexes A.4 et A.5),

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \quad (1.4)$$

où la notation $|\tilde{k} \tilde{l}\rangle = (|kl\rangle - |lk\rangle)$, à partir de laquelle on notera dans ce qui suit $\langle ij | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle$ par \tilde{v}_{ijkl} , et les sommations ici portent sur tous le spectre des états individuels i, j, k, l .

L'énergie de Hartree-Fock, qui est la valeur moyenne de \hat{H} dans l'état $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ (1.3) s'écrit

$$E_{\text{HF}} = \langle \Psi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Psi_{\text{HF}} \rangle. \quad (1.5)$$

À partir de la définition des éléments de la matrice densité $\hat{\rho}$,

$$\rho_{ij} = \langle \Psi_{\text{HF}} | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Psi_{\text{HF}} \rangle, \quad (1.6)$$

1.2 L'approche de Hartree-Fock

l'énergie en fonction de la densité [1], ou ce qu'on appelle la fonctionnelle d'énergie, peut s'écrire,

$$E[\rho] = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \rho_{ki} \tilde{v}_{ijkl} \rho_{lj}.$$

En utilisant les notations d'une trace et double trace. On peut écrire les deux termes de l'énergie respectivement,

$$E[\rho] = \text{Tr}(t \rho) + \frac{1}{2} \text{TrTr}(\rho \tilde{v} \rho),$$

avec la notation de la double trace entre les opérateurs A, C à un corps, et l'opérateur B à deux corps qui est définie par

$$\text{TrTr}(ABC) = \sum_{ik} A_{ki} \left(\sum_{lj} B_{ijkl} C_{lj} \right).$$

Dans la base (appelée canonique) où $\hat{\rho}$ est diagonale avec des valeurs propres 0 et 1, l'énergie de HF devient,

$$E_{\text{HF}} = \sum_i t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{v}_{ijij} \quad (1.7)$$

où ici les sommations portent sur tous les états occupés.

Pour assurer la normalisation des états occupés $|i\rangle$ pendant la variation, des multiplicateurs de Lagrange ε_i sont introduits. La minimisation de la quantité $E - \sum_i \varepsilon_i \langle i|i \rangle$, nous ramène à un problème aux valeurs propres d'un opérateur à un corps

$$\hat{h}(i)|\Phi_i\rangle = \varepsilon_i|\Phi_i\rangle \quad i = 1, \dots, A \quad (1.8)$$

où ε_i est l'énergie d'une particule dans l'état à une particule $|i\rangle$, et $\hat{h}(i)$ est l'Hamiltonien à un corps de la particule i , avec

$$[\hat{h}, \hat{\rho}] = 0.$$

L'Hamiltonien de HF est défini tel que

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{i=1}^A \hat{h}(i) = \hat{T} + \hat{U}_{\text{HF}}, \quad (1.9)$$

où \hat{U}_{HF} est la réduction de l'opérateur à un corps pour $\hat{\rho}$, à partir de l'opérateur à deux corps \hat{V} , dont ces éléments de matrice sont

$$\langle i|\hat{u}|j\rangle = \sum_{kl} \rho_{kl} \langle ik|\hat{v}|jl\rangle. \quad (1.10)$$

Dans la base canonique, où ρ est diagonale, on a

$$\langle i|\hat{u}|j\rangle = \sum_k \langle ik|\hat{v}|jk\rangle. \quad (1.11)$$

En seconde quantification, l'Hamiltonien de HF s'écrit,

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{HF}} &= \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_{ij} u_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \\ &= \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_{ijk} \tilde{v}_{ikjk} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j,\end{aligned}\quad (1.12)$$

dont les éléments de matrice (dans la base canonique) sont

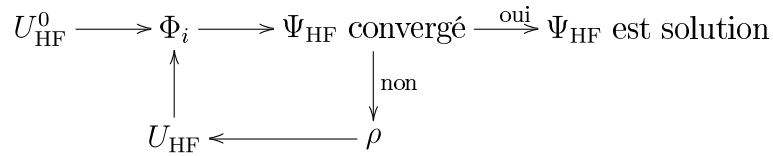
$$h_{ij} = \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho_{ji}} = t_{ij} + \sum_{k=1}^A \tilde{v}_{ikjk} = \varepsilon_i \delta_{ij}, \quad (1.13)$$

Il en résulte de la dépendance de l'interaction effective contenue dans le Hamiltonien (1.4) de la densité $\rho(\vec{r})$ du milieu, comme c'est le cas avec les forces de Skyrme, que les éléments de matrice de l'Hamiltonien de HF (1.13) comporte un terme supplémentaire appelé "champ de réarrangement"

$$\delta h_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \langle kk' | \frac{\partial v}{\partial \rho_{ji}} | \widetilde{kk'} \rangle.$$

Dans ce qui suit, ce terme ne sera pas inclu dans nos équations mais il est tenu en compte dans nos calculs.

Le procédé de résolution des équations couplées et non linéaires de HF (1.8) est itératif ou self-consistant, car celles-ci impliquent une équation aux valeurs propres dans laquelle le potentiel dépend de la densité (1.10). Une telle procédure est poursuivie jusqu'à que on obtienne une convergence, lorsque par exemple la différence des énergies entre deux itérations est inférieure à une certaine valeur.



On choisit un point de départ physiquement raisonnable (par exemple le potentiel de Woods-Saxon [5], ou le potentiel d'oscillateur harmonique). La solution de l'équation (1.8) forme une première estimation de l'ensemble des états individuels. Celle-ci nous permettent de calculer la densité (1.6), et donc un nouveau potentiel à un corps HF (1.10). Une fois que celui-ci est déterminé, on peut résoudre l'équation de Schrödinger à un corps, ce qui nous donne un nouvel ensemble d'états individuels, avec lesquels on détermine une nouvelle densité, ... etc, ainsi de suite jusqu'à ce que convergence soit atteinte.

Le vide de HF peut être schématisé par l'occupation des états individuels (*cf.* figure 1.1) par les A particules les plus basses en énergie, jusqu'à certain niveau donné appelé **le niveau de Fermi**, qui peut être entre le dernier niveau occupé est le premier niveau vide. Bien entendu on pourrait remplir d'autres états que ceux correspondant aux énergies

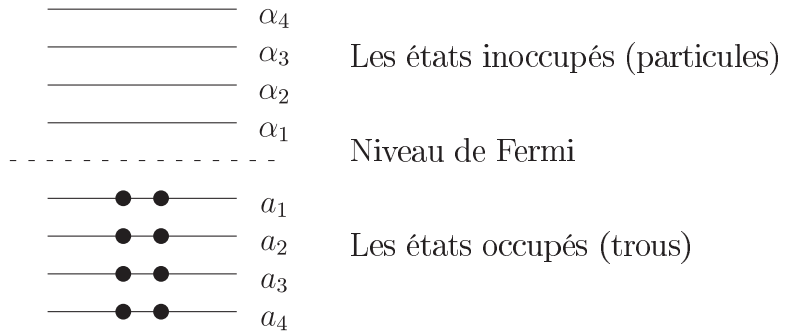


FIG. 1.1 – Représentation schématique du vide de Hartree-Fock pour un état de charge (en supposant la dégénérescence de Kramers).

ε_i les plus basses. On suppose néanmoins que le remplissage précédent conduit à l'énergie E la plus basse (ce qui est une hypothèse puisque $E \neq \sum_i \varepsilon_i$).

Il est usuel et nous le ferons dans la suite, d'appeler les états de **trous** les états en dessous du niveau de Fermi, et les états de **particules** les états au dessus du niveau de Fermi. Nous indiquons par la suite les états de particules par des lettres grecques (α, β, \dots), et les états de trous par des lettres latines (a, b, \dots).

1.3 Le choix de l'interaction

Un autre problème physique qui s'ajoute à celui technique de la résolution du problème à A corps, est la détermination de l'interaction nucléon-nucléon dans le milieu nucléaire à partir de laquelle on dérive le potentiel du champ moyen. Il est à la fois le plus ancien et en fait, un des problèmes les plus importants rencontré en physique nucléaire, à cause de notre relative méconnaissance de l'interaction entre deux nucléons, qui constitue néanmoins notre point de départ. Dans le cas des nucléons libres, cette interaction est relativement bien connue, à partir des expériences de diffusion nucléon-nucléon. Ceci a permis la construction d'interactions dites réalistes composées d'une partie à longue portée attractive décrite par l'échange d'un π , d'une partie à moyenne portée plus ou moins phénoménologique et d'un cœur dur ou plus ou moins mou. Parmi les plus connues, on notera le potentiel de Hamada-Johnston, les potentiels de Reid, le potentiel de Paris, ou le potentiel d'Argonne. Le problème du cœur dur très répulsif rend impossible une approche de champ moyen du type HF. Dans un tel milieu on met en avant le concept d'interaction nucléon-nucléon effective, c'est à dire d'interaction de deux nucléons en présence d'autres nucléons du noyau. De nombreux théoriciens se sont attachés, et s'attachent encore à l'heure actuelle, à élaborer des interactions effectives aussi performantes que possibles. On distingue deux types d'interactions effectives.

1.3.1 Interaction effective microscopique

C'est une interaction effective sensée tenir compte microscopiquement des corrélations de courte portée s'exerçant entre les nucléons dans le noyau. Elle permet de prendre en compte approximativement les effets à plusieurs corps, et la résolution du problème du cœur dur. Parmi les théories basées sur ce type d'interaction, on note le formalisme de la matrice G de Brueckner [6]. Dans la pratique ce type d'interaction est difficile à utiliser dans des calculs systématiques et demande des temps de calculs.

1.3.2 Interaction effective phénoménologique

C'est une paramétrisation a priori de la forme de l'interaction effective. Elle introduit un certain nombre de paramètres qui sont ajustés, pour reproduire certaines propriétés expérimentales, en particulier aux noyaux magiques, en général les propriétés statiques. Elle est utilisée -le jeu de paramètres restant fixé- sur l'ensemble de la table des nuclides. Il y a plusieurs types d'interactions phénoménologiques classées par exemple selon le comportement de leur partie centrale. Les deux forces nucléaires effectives les plus employées de nos jours dans les approches de champ moyen sont : l'interaction de Skyrme détaillée ci-dessous et l'interaction de Gogny. L'interaction de Skyrme utilise une interaction de type delta (δ) avec des termes de portée nulle. Les termes de portée finie de l'interaction de Gogny sont représentés par la somme de deux gaussiennes, l'une répulsive de courte portée, l'autre attractive de portée plus grande.

Les très nombreux travaux réalisés dans le cadre du champ moyen, avec les interactions effectives de Skyrme [7]-[17] et de Gogny [18]-[20] démontrent l'efficacité de ces deux interactions phénoménologiques. Elles ont pu être appliquées à tous les noyaux, y compris les plus lourds, et ont permis de reproduire, prédire ou d'interpréter un nombre considérable de résultats expérimentaux.

En particulier, il est apparu que la paramétrisation de Gogny offrait la possibilité d'obtenir en plus, des éléments de matrice d'appariement réalistes. En revanche, elle rend les calculs HF substantiellement plus lourds en ce qui concerne le traitement numérique. L'interaction de Skyrme, quant à elle de simple que nous présentons ci dessous, rend les calculs beaucoup plus simples à effectuer. C'est pour cette raison que nous allons l'utiliser dans nos calculs.

L'interaction de Skyrme

Elle a été proposée en 1959 par *Skyrme* [21] avec un terme à trois corps. Elle a pris une réelle importance avec les travaux de *Vautherin* et *Brink* [7, 8]. Ces auteurs ont montré dans le cas des noyaux paires-paires, l'équivalence entre un terme d'interaction δ à trois corps et une interaction δ à deux corps dépendant linéairement de la densité, .

Elle est connue d'une part par les bons résultats qu'elle a fourni dès sa première application aux propriétés des états fondamentaux comme l'énergie de liaison et le rayon des noyaux sphériques [7], et déformés [8]. Elle permet d'autre part la construction d'une

1.3 Le choix de l'interaction

fonctionnelle pour l'énergie totale, qui rend le traitement numérique très simple des calculs HF.

Sa forme standard dans l'espace de configuration [7], se met sous la forme d'une somme de termes :

$$\begin{aligned}
 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}^\sigma) \delta(\vec{r}) \quad \text{terme central} \\
 & + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 \hat{P}^\sigma) [\overleftarrow{K}^2 \delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r}) \overrightarrow{K}^2] + t_2(1 + x_2 \hat{P}^\sigma) \overleftarrow{K}' \cdot \delta(\vec{r}) \overrightarrow{K} \quad \text{non locaux} \\
 & + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 \hat{P}^\sigma) [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}) \quad \text{terme dépendant de la densité} \\
 & + iW_0 \vec{\sigma} \cdot [\overleftarrow{K}' \times \delta(\vec{r}) \overrightarrow{K}] \quad \text{terme spin orbite}
 \end{aligned} \tag{1.14}$$

avec les notations usuelles :

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad \vec{\sigma} = \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2,$$

où \overrightarrow{K} , et \overleftarrow{K}' sont les opérateurs de moment relatif définis tel que

$$\overrightarrow{K} = \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2), \quad \overleftarrow{K}' = -\frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2),$$

et où \hat{P}^σ l'opérateur d'échange de spin,

$$\hat{P}^\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2).$$

Les valeurs des paramètres $t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, x_1, x_2, x_3, \alpha, W_0$ ont été ajustées, depuis les premières paramétrisations classiques (SI et SII) de *Vautherin* et *Brink* [7, 8], et (SIII-SVI) de *Beiner* et *al.* [10] pour reproduire les propriétés des états fondamentaux des noyaux (énergie et rayon). L'interaction SIII est l'une des toutes premières à avoir réussi à reproduire correctement les propriétés statiques des noyaux à travers toute la table périodique. *Krivine* et *al.* [11] ont introduit SkM, pour l'étude des résonances électrique dipolaire et monopolaire. Elle a été modifiée (SkM*) par *Bartel* et *al.* [13], pour reproduire de façon très satisfaisante les barrières de fission dans le ^{240}Pu . *Nguyen Van Giai* et *Sagawa* [12] ont pu obtenir avec SGII des valeurs satisfaisantes des paramètres de Landau spin et spin-isospin. *Tondeur* et *al.* [14] ont développé une interaction RATP, en ajoutant deux paramètres qui dépendent de J^2 et J_q^2 , qui seront définis plus loin (*cf.* section 1.4). *Dobaczewski* et *al.* [15] ont traité les corrélations d'appariement dans les isotopes d'étain avec la force SkP. *Chabanat* et *al.* [16] ont pu décrire avec SLy4 les propriétés spectroscopiques des noyaux loins de la vallée de stabilité.

Des interactions de Skyrme les plus utilisées sont données dans la référence [22]. Dans nos calculs HF nous avons utilisé les paramétrisations SIII et SkM*, où nous avons reporté dans la Table 1.1 les valeurs de leurs paramètres.

Force	SIII	SkM*
$t_0(\text{MeV fm}^3)$	-1128.75	-2645.00
$t_1(\text{MeV fm}^5)$	395.00	410.00
$t_2(\text{MeV fm}^5)$	-95.00	-135.00
$t_3(\text{MeV fm}^{(3+3\alpha)})$	14000.0	15595.0
x_0	0.450	0.090
x_1	0.000	0.000
x_2	0.000	0.000
x_3	1.000	0.000
α	1	1/6
$W_0(\text{MeV fm}^5)$	120.0	130.0

TAB. 1.1 – Paramètres des deux interactions de Skyrme que nous avons utilisées.

1.4 La fonctionnelle d'énergie

Les auteurs de la référence [7] ont montré qu'avec une interaction de Skyrme, et en supposant l'invariance par renversement du temps, l'énergie totale du noyau peut s'exprimer en une intégrale de la fonctionnelle d'énergie totale \mathcal{H}_{tot} ,

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int \mathcal{H}_{\text{tot}}(\vec{r}) d^3r$$

La fonctionnelle d'énergie \mathcal{H}_{tot} est une fonction d'un certains nombre de densités locales qui sont :

– la densité des nucléons

$$\rho_q(\vec{r}) = \sum_{i\sigma} |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, q)|^2,$$

– leurs densité d'énergie cinétique

$$\tau_q(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, q)|^2$$

– leurs densité spin-orbite

$$\vec{J}_q(\vec{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma\sigma'} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, q) \left[\vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma', q) \times \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle \right].$$

où les sommations i (espace), et σ, σ' (spin) portent sur tous les états occupés d'une particule et q représente les différents états de charge (les neutrons (n) et les protons (p)).

Ce qui précède supposait que le sous espace des états à une particule est invariant par renversement du temps, la fonctionnelle \mathcal{H}_{tot} peut être décomposée en une somme de termes

$$\mathcal{H}_{\text{tot}}(\vec{r}) = \mathcal{H}_{\text{kin}}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{\text{vol}}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{\text{surf}}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{\text{s.o}}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{\text{Coul}}(\vec{r}).$$

1.4 La fonctionnelle d'énergie

Ces termes sont respectivement les densités d'énergie cinétique, de volume, de surface, spin-orbite, et Coulombienne, telle que

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{kin}}(\vec{r}) &= \frac{A-1}{A} \frac{\hbar^2}{2m} \tau. \\
\mathcal{H}_{\text{vol}}(\vec{r}) &= \frac{1}{2} t_0 \left[\left(1 + \frac{1}{2} x_0\right) \rho^2 - \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \sum_q \rho_q^2 \right] \\
&\quad + \frac{1}{12} t_3 \left(1 + \frac{1}{2} x_3\right) \rho^{\gamma+2} - \frac{1}{12} t_3 \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \rho^\gamma \sum_q \rho_q^2 \\
&\quad + \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{1}{2} x_1\right) + t_2 \left(1 + \frac{1}{2} x_2\right) \right] \rho \tau - \frac{1}{4} \left[t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) - t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \right] \sum_q \rho_q \tau_q. \\
\mathcal{H}_{\text{sur}}(\vec{r}) &= -\frac{1}{16} \left[3t_1 \left(1 + \frac{1}{2} x_1\right) - t_2 \left(1 + \frac{1}{2} x_2\right) \right] \rho \vec{\nabla}^2 \rho \\
&\quad + \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \right] \sum_q \rho_q \vec{\nabla}^2 \rho_q. \\
\mathcal{H}_{\text{s.o.}}(\vec{r}) &= -\frac{1}{2} W_0 \left[\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \sum_q \rho_q \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q \right]. \\
\mathcal{H}_{\text{Coul}}(\vec{r}) &= \frac{1}{2} \rho_p V_{\text{dir}} - V_{\text{ech}}.
\end{aligned}$$

où les densités totales sont $\rho = \rho_n + \rho_p$, $\tau = \tau_n + \tau_p$, $\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p$, et le potentiel Coulombien direct est défini par

$$V_{\text{dir}}(\vec{r}) = e^2 \int \frac{\rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r',$$

(e étant la charge du proton), tandis que le terme Coulombien d'échange est défini par

$$V_{\text{ech}}(\vec{r}) = \frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{3/4} \rho_p^{4/3},$$

Notons que le terme d'énergie cinétique \mathcal{H}_{kin} est multiplié ici par un facteur $(A-1)/A$, qui correspond à une correction approchée à un corps du centre de masse, en négligeant la correction à deux corps.

Les équations de HF sont obtenues dans le cas de l'interaction de Skyrme (*cf.* [7]) par dérivation fonctionnelle de l'énergie par rapport aux fonctions d'onde individuelles. On les écrit comme,

$$\left[-\vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\vec{r})} \vec{\nabla} + U_q(\vec{r}) + \vec{W}_q(\vec{r}) \cdot (-i)(\vec{\nabla} \times \vec{\sigma}) \right] \Phi_i^{(q)}(\vec{r}, \sigma) = \varepsilon_i \Phi_i^{(q)}(\vec{r}, \sigma). \quad (1.15)$$

où les différents termes sont définis comme :

- un terme de masse effective dépendant de la densité

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\vec{r})} = \frac{A-1}{A} \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4} (t_1 + t_2) \rho + \frac{1}{8} (t_2 - t_1) \rho_q.$$

- un terme potentiel central,

$$U_q(\vec{r}) = t_0 \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_0\right)\rho - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right)\rho_q \right] + \frac{1}{4}t_3(\rho^2 - \rho_q^2) \\ - \frac{1}{8}(3t_1 - t_2)\nabla^2\rho + \frac{1}{16}(3t_1 + t_2)\nabla^2\rho_q + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\tau \\ + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\tau_q - \frac{1}{2}W_0(\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q) + \delta_{q,p}V_c(\vec{r}).$$

où $\delta_{q,p}$ signifie que le potentiel Coulombien n'est ajouté au potentiel $U(r)$ que dans le cas des protons (p).

- un terme potentiel spin-orbite,

$$\vec{W}_q(\vec{r}) = \frac{1}{2}W_0(\vec{\nabla}\rho + \vec{\nabla}\rho_q) + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\vec{J}_q(\vec{r}).$$

1.5 Hartree-Fock et brisures de symétries

L'un des « inconvénients » majeurs des approches du champ moyen en physique des solutions nucléaire est la brisure de symétries (rotation, translation, renversement du temps ...). Ceci conduit au fait que l'Hamiltonien de HF ne garde pas nécessairement les mêmes symétries que celles du Hamiltonien effectif (1.2). Par exemple l'état HF n'est pas nécessairement un état propre du carré du moment angulaire total \hat{J}^2 (éventuellement de J_z), alors la symétrie par rotation est brisée.

Dans ce travail, nous ne considérons que des noyaux pairs-pairs. Nous imposerons en outre aux solutions d'être paires par renversement du sens du temps, d'avoir la symétrie de rotation axiale (ici suivant l'axe $(\vec{O}z)$) et la symétrie de réflexion droite-gauche. Pour cela, nous avons développé les orbitales HF sur une base tronquée d'états propres de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A) (*cf.* annexe C.1), où la troisième composante J_z du moment angulaire total, et la parité sont des bons nombres quantique, pour les états individuels $|\Phi_i\rangle$. On notera par k_i la valeur propre de J_z pour l'état à une particule $|\Phi_i\rangle$ et π_i sa parité. Les états HF sont des états de neutrons ou protons, ils sont donc des états propres de la troisième composante τ_z de l'opérateur d'isospin, avec les valeurs propres $q_i = -\frac{1}{2}$ pour protons, $+\frac{1}{2}$ pour neutrons.

Chapitre 2

LES CORRÉLATIONS D'APPARIEMENT

Le Hamiltonien \hat{H} d'un système nucléaire de A particules individuelles, qui est défini par l'équation (1.2), peut être décomposé (*cf.* section 2.2.2) de façon générale comme

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{V}_{\text{res}},$$

en un opérateur à un corps de champ moyen \hat{H}_{MF} (où MF vient du terme mean field qui signifie champ moyen) et un terme d'interaction résiduelle \hat{V}_{res} .

Dans l'approche pure de HF, l'interaction résiduelle est considérée comme une perturbation qu'on néglige. Ceci peut être assez justifié pour la fonction d'onde du fondamental dans la description des noyaux, pour lesquels il existe dans le spectre de particules individuelles un gap en énergie important entre le dernier niveau occupé et le premier état vide, comme ceci est le cas des noyaux pairs-pairs à couches complètes. Par contre, dès que l'on veut décrire les états fondamentaux de noyaux situés en milieu de couches, l'approximation de HF n'est pas suffisante, car la densité de niveaux au voisinage du niveau de Fermi n'est pas négligeable. Ceci conduit à la possibilité de fortes corrélations entre les nucléons. Dans ce cas l'interaction résiduelle n'est plus une perturbation négligeable. Elle joue un rôle important dans la détermination du fondamental, qui n'est donc plus un simple déterminant de Slater de particules individuelles, mais aura en effet une énergie non perturbative proche de celle des premiers états excités de type particule-trou, qui sont construits à partir du vide de HF.

Pour reconstruire une fonction d'onde représentant correctement l'état fondamental de ces noyaux, il est donc nécessaire d'aller **au delà du champ moyen**, en tenant compte de différentes corrélations. Les plus fréquentes sont les corrélations d'appariement qui se manifestent le plus fortement dans les noyaux à couches de proton et/ou neutron ouvertes. Afin de les inclure, des extensions spécifiques de la théorie du champ moyen sont employées. Les plus courantes sont les théories de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) ou HF+BCS.

Un autre type de corrélations qui provient des oscillations collectives du champ moyen, sont les corrélations vibrationnelles. Elles sont traitées par les théories RPA (Random Phase Approximation) ou QRPA (Quasi-particule Random Phase Approximation) pour décrire les oscillations collectives de faible amplitude du champ moyen et par exemple par

la Méthode de la Coordonnée Génératrice (GCM) dans le cas des oscillations collectives de grande amplitude.

Dans ce chapitre on s'intéresse d'abord aux corrélations d'appariement traitées dans le cadre de HF+BCS et HTDA. Les corrélations vibrationnelles sont le sujet principal de cette thèse, elles seront traitées au chapitre 3 dans le cadre d'HTDA.

2.1 L'Approximation BCS

2.1.1 L'approche de Bardeen, Cooper et Schrieffer et l'appariement

La possibilité d'exciter facilement par transferts d'une paire d'états conjugué par renversement du sens du temps, un système de nucléons a conduit à proposer l'hypothèse de l'appariement nucléaire. Ceci est particulièrement réalisé dans les noyaux, où le gap d'énergie entre le dernier niveau occupé et le premier niveau vide est petit ou du même ordre de grandeur que l'espacement moyen entre les niveaux, contrairement à une situation où ce gap est grand, relatif à cet espacement moyen.

Donnons un argument simplifié dans le cas où le spin est un bon nombre quantique. Dans ce cas, pour des noyaux pairs-pairs, l'interaction entre les nucléons de même fonction spatiale ayant la projection de leur spin opposée est attractive dans le canal ($S = 0, T = 1$). Supposant que l'interaction est paire par rapport aux variables d'espace comme, par exemple avec l'interaction δ . Elle va exciter des paires de nucléons corrélés dans le noyau, créant des corrélations dites d'appariement.

Ce phénomène est analogue à la supraconductivité en physique du solide. Il a été proposé en 1957 par *J. Bardeen, L. Cooper et R. Schrieffer* [23], une explication théorique du fait que les électrons se couplent en paires (les paires de Cooper) appelée plus tard théorie de BCS. Les états de deux électrons de telles paires sont reliés l'un à l'autre par renversement du temps. De telles paires se comportent comme des bosons. La première description théorique à la BCS de l'appariement nucléaire a été effectué en 1958 par *Bohr, Mottelson et Pines* [24].

2.1.2 La transformation de Bogoliubov

La transformation de Bogoliubov est une transformation linéaire, qui fait passer l'ensemble des couples $(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i)$ opérateurs de création et d'annihilation respectivement, dans l'état i , aux opérateurs de quasiparticules correspondant $(\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i)$ [25] tel que

$$\begin{aligned}\hat{b}_i^\dagger &= \sum_k \left(X_{ik} \hat{a}_k^\dagger + Y_{ik} \hat{a}_k \right) \\ \hat{b}_i &= \sum_k \left(X_{ik}^* \hat{a}_k + Y_{ik}^* \hat{a}_k^\dagger \right)\end{aligned}\tag{2.1}$$

où X et Y sont des matrices complexes.

2.1 L'Approximation BCS

On parle d'une transformation canonique si les opérateurs $(\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j)$ satisfont $\forall i, j$ aux mêmes relations d'anticommutation que celles des opérateurs $(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j)$

$$\{\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger\} = 0.$$

avec la définition de l'anticommutateur $\{a, b\} = ab + ba$.
Ceci entraîne les conditions suivante [26]

$$\begin{aligned} X^\dagger X + Y^\dagger Y &= \mathbb{1} \\ X^\dagger Y^\dagger + Y^\dagger X^\dagger &= 0 \\ X^T Y + Y^T X &= 0 \\ X^T X^\dagger + Y^T Y^\dagger &= \mathbb{1} \end{aligned} \tag{2.2}$$

et

$$\begin{aligned} X X^\dagger + Y Y^\dagger &= \mathbb{1} \\ X Y^\dagger + Y^\dagger X^T &= 0 \\ X^\dagger Y^T + Y X^\dagger &= 0 \\ X^\dagger X^T + Y Y^\dagger &= \mathbb{1} \end{aligned} \tag{2.3}$$

où X^t et Y^t sont les matrices transposées des matrices X et Y .

On dira que les opérateurs $\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i$ sont des opérateurs de quasi-particules, s'il existe un état normalisé $|\tilde{0}\rangle$ tel que :

$$\hat{b}_i |\tilde{0}\rangle = 0, \quad \forall i.$$

Cet état $|\tilde{0}\rangle$ est appelé vide de quasi-particules ou quasi-vide, et une telle transformation linéaire et canonique est appelée transformation de Bogoliubov.

2.1.3 La fonction d'onde de BCS

Un cas particulier de la transformation de Bogoliubov est la transformation de Bogoliubov-Valatin, définie par

$$\hat{b}_i^\dagger = u_i \hat{a}_i^\dagger - v_i \hat{a}_{\bar{i}}, \tag{2.4}$$

avec u_i et v_i réels et vérifiant la condition

$$u_i = u_{\bar{i}} > 0, \quad v_i = -v_{\bar{i}} > 0, \quad i > 0, \tag{2.5}$$

où les états d'une particules i et \bar{i} forment l'espace d'une particule et sont reliés par l'opérateur de renversement du sens du temps. De telle sorte que l'espace des états à un corps sont partitionnés en des états $i > 0$ et des états $\bar{i} < 0$.

On constate que la transformation (2.4) satisfait à la première condition de canonicité (2.2), ce qui garantie qu'elle est effectivement une transformation canonique, alors que la condition (2.3) conduit à la condition d'unitarité

$$u_i^2 + v_i^2 = 1 \quad \forall i. \tag{2.6}$$

On démontre que v_i^2 et u_i^2 sont respectivement les probabilités d'occupation (c'est à dire ρ_{ii}) et d'inoccupation ($1 - \rho_{ii}$) de l'état i (où \bar{i}).

On peut montrer également que l'état du quasi-vide associé à cette transformation canonique est ce qu'on appelle la fonction d'onde de BCS définie par :

$$|\tilde{0}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle = |\Psi_{\text{BCS}}\rangle, \quad (2.7)$$

où le produit porte sur la moitié de l'espace de configuration d'une particule indiqué par $k > 0$. $|0\rangle$ représente le vide («le vrai vide») par rapport aux opérateurs a^\dagger et a .

Le développement du produit de l'équation (2.7) nous donne

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle \propto |0\rangle + \sum_{k>0} \frac{v_k}{u_k} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,k'>0} \frac{v_k v_{k'}}{u_k u_{k'}} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'}^\dagger |0\rangle + \dots$$

soit une somme de déterminants de Slater ayant des nombres de particules pairs.

La généralisation de l'opérateur de création d'une paire de particules [1]

$$A^\dagger = \sum_{k>0} \frac{v_k}{u_k} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger,$$

conduit à un état de BCS défini comme suit,

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle \propto \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (A^\dagger)^\nu |0\rangle.$$

Le système est alors décrit non en terme de particules indépendantes, mais en termes de paires indépendantes. Comme on l'a vu, l'état $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$ n'est pas un état propre de l'opérateur nombre de particules \hat{N} . C'est le grand défaut de cette méthode. Le nombre de particules N n'est fixé qu'en valeur moyenne par,

$$\langle \Psi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_{i>0} v_i^2 = N,$$

en contraignant le système par un multiplicateur de Lagrange sur cette valeur moyenne.

Cette violation du nombre de particules n'a guère d'importance en physique du solide, où le nombre de particules est typiquement de l'ordre ou proche du nombre d'Avogadro ($N \simeq 10^{23}$) [1]. La dispersion qu'on peut montrer être égale à $1/\sqrt{N}$ est donc faible. Ceci n'est pas le cas en physique nucléaire où $N \approx 10 - 100$ et où le problème devient donc réel.

L'approximation BCS permet donc un traitement approché des effets d'appariement. Cependant, elle brise une symétrie (celle de la conservation du nombre de particules) qui s'ajoute aux symétries déjà brisées dans l'approximation de HF (*cf.* section 1.5) qui est un point de défaut.

On notera que dans certains cas où la densité de la surface de Fermi est forte, la convergence du processus HF auto cohérent est difficile à obtenir (on observe des oscillations dans le processus itératif). Ceci peut être le signe que l'approximation de HF pur n'est pas bonne. Dans ce cas on peut introduire des corrélations d'appariement, par exemple de type BCS, qui nous permet d'obtenir un champ moyen convergé.

2.2 L'Approche HTDA

Les états BCS ne sont pas des états propres de l'opérateur nombre de particules. On a seulement garanti que ces nombres sont égaux en valeur moyenne à ceux désirés à travers des contraintes sur les opérateurs \hat{N} et \hat{Z} , en utilisant les multiplicateurs de lagranges λ_N et λ_Z respectivement. La variance $\Delta N = (\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2)^{1/2}$ est donc non nulle. Pour parer à ce défaut, il a fallu développer des techniques spécifiques de restauration. La projection est une de ces techniques. Elle constitue en un mélange de configuration avec des coefficients qui sont choisis de telle sorte qu'on obtienne un bon nombre quantique (nombre de particules, moment angulaire, ...). La projection de la fonction d'onde du système qui brise la symétrie, conduit à une fonction d'onde qui contient les bonnes symétries, mais en même temps elle ne peut garantir par elle seule que la solution représente correctement l'état physique concerné (par exemple l'état fondamental). On peut appliquer un principe variationnel soit avant la projection (PAV) [27] soit après la projection (VAP) [28, 29, 30]. Dans le cadre du modèle de BCS, la projection de la fonction d'onde après variation sur les états ayant le bon nombre de particules (PBCS), serait incapable de décrire correctement des corrélations d'appariement dans des noyaux, où la densité de niveaux autour de surface de Fermi serait si faible, que le comportement d'une solution BCS et donc PBCS serait identique à celui de HF (*cf.* [1]).

Dans ce contexte, l'approche Higher Tamm Dancoff Approximation (**HTDA**) a été proposée pour traiter les corrélations d'appariement au delà du champ moyen en garantissant l'exacte **conservation du nombre de particules**. Elle a été appliquée dans des situations de faibles corrélation d'appariement, comme en [31, 32] pour décrire le fondamental et les états isomériques dans le ^{178}Hf . Un code a été développé par la suite [33] avec succès pour étudier les noyaux impairs. Des calculs de routhian HTDA ont été effectués [34] pour décrire les bandes super-déformées dans la région $A \sim 190$. Dans le cadre de la même approche, une étude a été présentée en [35, 36] pour traiter les corrélations d'appariement isoscalaires et isovecteurs de l'état fondamental dans la région du ^{64}Ge .

2.2.1 Le principe de l'approche HTDA

En pratique, l'approche HTDA est basée sur la résolution de l'équation Schrödinger dans un espace tronqué à N particules, de façon équivalente aux calculs de modèle en couches. Dans notre cas la base à N corps est fortement tronquée, parce qu'on utilise un vide $|\Phi_0\rangle$ de type champ moyen qui contient une bonne partie des propriétés physiques à un corps. À priori, elle est équivalente à la méthode de variation après la projection (VAP), à cause du théorème de Ritz dans un espace de Fock à N particules après projection des états à un corps sur une base tronquée.

Elle consiste en une extension de l'Approximation Tamm-Dancoff (TDA) [1, 37] incluant des excitations au delà des excitations 1particule-1trou, où non seulement les états excités sont corrélés, mais aussi le fondamental. Elle peut décrire en particulier le phénomène de diffusion de paires autour de la surface de Fermi, et en général des excitations de type multi-particules multi-trous sur le vide $|\Phi_0\rangle$ représenté en pratique par un déterminant

de Slater, solution d'un calcul HF self-consistant. Dans ce cas la fonction d'onde totale devient une superposition de déterminants de Slater, ayant chacun le bon nombre de particules construits à partir des excitations $|nph\rangle$ avec n faible.

L'approche HTDA permet d'assurer de façon praticable en temps de calcul la conservation du nombre de particules, quand on tient compte des corrélations au delà du champ moyen, c'est à dire négligées dans les théories du champ moyen (HF).

2.2.2 Le formalisme HTDA

Hamiltonien

L'Hamiltonien effectif \hat{H} d'un système à N particules (1.2) s'écrit en seconde quantification (1.4) (*cf.* annexe A),

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \quad (2.8)$$

En utilisant le théorème de Wick généralisé (*cf.* annexe A), où le produit des opérateurs de création et d'annulation pour le quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ devient

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} + : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j : = \delta_{ij} + : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j : \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k &= - \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l} : \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k : + \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k} : \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l : + \underline{\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k : - \underline{\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l : \\ &\quad - \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l} \underline{\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k} + \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k} \underline{\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l} + : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k : \\ &= - \delta_{il} : \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k : + \delta_{ik} : \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l : + \delta_{jl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k : - \delta_{jk} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l : \\ &\quad - \delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jl} + : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k : \end{aligned} \quad (2.10)$$

où $c_1 c_2$, et $: c_1 c_2 :$ sont la contraction et le produit normal des opérateurs c_1 et c_2 respectivement.

En utilisant les identités (2.9) et (2.10) dans l'équation (2.8), on trouve

$$\hat{H} = \sum_i^{t_{\text{HF}}} t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{ij}^{t_{\text{HF}}} \tilde{v}_{ijij} + \sum_{ij} \left[t_{ij} + \sum_k^{t_{\text{HF}}} \tilde{v}_{ikjk} \right] : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j : + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k : \quad (2.11)$$

Les sommations ici et dans ce qui suit avec indice t_{HF} veut dire qu'elles portent juste sur les états occupés de HF et les sommations sans cet indice portent sur tous le spectre d'une particule.

En utilisant les deux équations (1.7) et (1.13), l'Hamiltonien (2.11) devient,

$$\hat{H} = E_{\text{HF}} + \sum_i \varepsilon_i : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i : + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k :. \quad (2.12)$$

En définissant $\sum_i \varepsilon_i : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i : = \hat{H}_{\text{IQP}}$, comme un Hamiltonien de quasiparticules indépendantes, l'équation (2.12) devient,

$$\hat{H} = \underbrace{E_{\text{HF}} + \hat{H}_{\text{IQP}}}_{\hat{H}_{\text{MF}}} + \underbrace{\frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k :}_{\hat{V}_{\text{res}}} \quad (2.13)$$

2.2 L'Approche HTDA

Il est clair, que l'Hamiltonien (2.13) est la somme d'un terme de champ moyen \hat{H}_{MF} associé au vide, et d'un terme d'interaction résiduelle \hat{V}_{res} responsable de tous types de corrélations,

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{V}_{\text{res}},$$

où

$$\hat{H}_{\text{MF}} = E_{\text{HF}} + \hat{H}_{\text{IQP}} = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + \hat{H}_{\text{IQP}},$$

et $|\Phi_0\rangle \equiv |\Psi_{\text{HF}}\rangle$ est un déterminant de Slater défini par l'équation (1.3) qui est solution du Hamiltonien \hat{H} avec une énergie propre E_{HF} .

Puisque, l'Hamiltonien de HF s'écrit en seconde quantification

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \hat{T} + \hat{U}_{\text{HF}} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_k \sum_{ij} \tilde{v}_{ikjk} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j,$$

en remplaçant par l'équation (2.9), on trouve

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_i t_{ii} + \sum_{ij} \tilde{v}_{ijij} + \sum_{ij} \left(t_{ij} + \sum_k \tilde{v}_{ikjk} \right) : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j :.$$

Donc, le terme \hat{H}_{MF} du champ moyen peut se réécrire, en fonction de l'Hamiltonien de HF, comme

$$\hat{H}_{\text{MF}} = E_{\text{HF}} + \hat{H}_{\text{IQP}} = \hat{H}_{\text{HF}} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{v}_{ijij} = \hat{H}_{\text{HF}} - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle.$$

Pour le terme d'interaction résiduelle \hat{V}_{res} , nous allons utiliser les expressions du potentiel effectif \hat{V} et sa réduction à un corps \hat{U}_{HF} pour $|\Phi_0\rangle$,

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{v}_{ijij} + \sum_k \sum_{ij} \tilde{v}_{ikjk} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j : + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k : \\ \hat{U}_{\text{HF}} &= \sum_{ij} \tilde{v}_{ijij} + \sum_k \sum_{ij} \tilde{v}_{ikjk} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j :. \end{aligned}$$

Donc le terme d'interaction résiduelle devient

$$\hat{V}_{\text{res}} = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k : = \hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{v}_{ijij}.$$

En conclusion, l'Hamiltonien total effectif \hat{H} peut se décomposer, tel que

$$\hat{H} = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + \hat{H}_{\text{IQP}} + \hat{V}_{\text{res}}, \quad (2.14)$$

ou autrement

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{HF}} - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle + \hat{V}_{\text{res}}, \quad (2.15)$$

où

$$\hat{V}_{\text{res}} = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k := \hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle. \quad (2.16)$$

Le terme d'interaction résiduelle négligé habituellement dans l'approximation HF, introduit des corrélations non seulement d'appariement, mais peut s'appliquer en fait au traitement de tous type de corrélations. Pour cela, le Hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{V}_{\text{res}}$ sera diagonalisé sur une base comprenant le déterminant de Slater de l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ et les états résultant d'excitations multi-particules (n_p) multi-trous (n_h) sur $|\Phi_0\rangle$

$$|\Phi_n\rangle = \prod_{k=1}^{n_p} \prod_{l=1}^{n_h} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l |\Phi_0\rangle. \quad (2.17)$$

où n est l'ordre d'excitation $|n_p n_h\rangle$. Dans le cas $n = 0$ l'état $|0_p 0_h\rangle$ est bien entendu le fondamental HF $|\Phi_0\rangle$.

Interactions

Dans le cadre de l'approximation traditionnelle du modèle pairing-plus-multipole [39, 40], l'interaction phénoménologique \hat{V} est décomposée en multipole comme,

$$\hat{V}(\vec{r}_{12}) = \sum_{\ell} f_{\ell}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) P_{\ell}(\cos \theta_{12})$$

où $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, et $P_{\ell}(\cos \theta_{12})$ est le polynôme de Legendre d'ordre ℓ , où θ_{12} est l'angle de séparation entre les deux particules. Le polynôme prend des valeurs importantes pour $\theta_{12} \leq 1/\ell$, avec un maximum pour $\theta_{12} = 0$.

Comme rappelé en [38], les deux particules interagissent si $r_{12} < R/\ell$, où R est la valeur moyenne de $|\vec{r}_1|$ et $|\vec{r}_2|$. La portée de l'interaction dépend de l'ordre ℓ de multipolarité. Pour des grandes multipolarités, la force a un effet à courte portée, et pour de basses multipolarités, elle a un effet à longue portée. Pour cela, l'interaction \hat{V} peut être décomposée généralement, en une somme de termes multipole-multipole. La somme des termes de grande multipolarité est responsable principalement des corrélations de courte portée, et la somme des termes de basse multipolarité conduit principalement aux corrélations de longue portée.

Dans notre approche, nous avons approché l'expression « exacte » de la partie à deux corps de l'interaction résiduelle par l'interaction \hat{V} définie schématiquement dans la référence [41] par :

$$\hat{V}_{\text{res}} = V_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \sum_{\ell=\ell_{\min}}^{\ell_{\max}} \sum_{\mu=-\ell}^{\ell} V_{\ell} \hat{Q}_{\ell}^{\mu} \hat{Q}_{\ell}^{-\mu}.$$

où V_0 et V_{ℓ} sont les intensités des interactions delta et multipole-multipole respectivement.

Comme on le voit, nous avons utilisé dans la partie de courte portée une interaction delta (δ) [42] pour traiter l'appariement. Pour la partie de longue portée on s'est limité à une interaction quadrupole-quadrupole ($\ell = 2$). Ainsi, nous ne pouvons traiter qu'une partie (la partie dominante) des corrélations vibrationnelles.

Un tel modèle (pairing+quadrupole) (*cf.* la référence [43]) a été utilisé par *Belyaev* [44], où les particules interagissent avec une simple force à deux corps représentée par deux composantes : l'appariement proposé dans la supraconductivité, et discuté dans le cadre du problème nucléaire par Bohr, Mottelson, et Pines [24], et la partie de longue portée représentée par l'interaction quadrupole-quadrupole considérée dans les travaux d'Elliot [45]. La première comparaison quantitative du modèle avec l'expérience a été effectuée par *Kisslinger et Sorensen* [40], dans l'étude de noyaux à couches fermées.

Un nombre important de calculs [46] a été réalisé dans le cadre de ce même modèle, pour l'étude des noyaux déformés. L'étude de quelques noyaux sphériques l'a été par les auteurs de la référence [43].

Pour la partie de \hat{H} (2.15) qui définit \hat{H}_{HF} (canal particule-trou), nous avons pris l'interaction de Skyrme. Ce choix rend donc notre Hamiltonien non auto-cohérent, mais ce défaut est expliqué en partie par le fait que la plupart des paramétrisations de Skyrme [7]-[16] n'ont pas été développées pour la description (dans le canal particule-particule) du phénomène d'appariement, à l'exception de certaines dont la paramétrisation SkP [15]. L'interaction de Gogny est capable de reproduire les propriétés de type *pt/tp* et *pp/tt*. Ceci permet aux auteurs de la référence [47] d'utiliser la même interaction dans des calculs de type HTDA.

2.2.3 La construction de la base $|npnh\rangle$

La construction de la base à N corps à partir du vide $|\Phi_0\rangle$ est schématisée sur la figure 2.1, où les lignes continues correspondent aux états individuels de HF, les lignes pointillées aux niveaux de Fermi, les cercles pleins aux états occupés, et les cercles vides aux états inoccupés. Par définition les états de trous (notés ici *t*) sont les états d'énergie au dessous du niveau de Fermi ($\varepsilon_i < \varepsilon_F$), et les états de particules (notés par *p*) se trouvent au dessus du niveau de Fermi ($\varepsilon_i > \varepsilon_F$). Dans notre cas l'énergie de Fermi ε_F est définie par la moyenne de la somme de l'énergie de la dernière couche pleine et l'énergie de la première couche vide.

Cette présentation est pour un seul type de nucléon (neutron ou proton), il faudrait la redoubler en tenant compte des deux nucléons en même temps.

Du fait des symétries imposées (symétrie axiale et de réflexion droite-gauche), *cf.* section 1.5, la projection du moment angulaire total (troisième composante du moment angulaire) et la parité (π) sont des bons nombres quantiques. Les états de nucléons qui se trouvent à gauche de chaque schéma ont une valeur *k* (valeur propre de la troisième composante du moment angulaire d'une particule) positive, et ceux qui se trouvent à droite ont une valeur de *k* négative.

La construction de la base à N corps, pour un état K^Π donné (ici $K^\Pi = 0^+$) de neutrons ou de protons est le résultat d'excitation de type $|npnh\rangle$ à partir d'un déterminant de

Slater solution de HF. Dans le cas des noyaux pairs-pairs, avec un état fondamental $K^\Pi = 0^+$, cette base contient :

- un état vide $|0p0h\rangle$ qui est le vide de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$.
- les configurations $|1p1h\rangle$ caractérisées par l'excitation d'une particule d'un état de trou $k_t^{\pi_t}$, vers un état de particule $k_p^{\pi_p}$. Ce type d'excitation n'est possible que si

$$K = k_p - k_t$$

$$\Pi = \pi_p \pi_t.$$

- les configurations $|2p2h\rangle$ résultats d'excitations de deux particules des états de trous $k_{t1}^{\pi_{t1}}$ et $k_{t2}^{\pi_{t2}}$, vers les états de particules $k_{p1}^{\pi_{p1}}$ et $k_{p2}^{\pi_{p2}}$. Ces excitations sont permises si :

$$K = (k_{p1} + k_{p2}) - (k_{t1} + k_{t2})$$

$$\Pi = \pi_{p1} \pi_{p2} \pi_{t1} \pi_{t2}.$$

Les transferts d'une paire sont un cas particulier de ce type d'excitation (2p2h), où il y a diffusion d'une paire de particules appartenant à deux états dégénérés de Kramers avec $k_{t1}^{\pi_{t1}} = -k_{t1}^{\pi_{t1}} = -k_{t2}^{\pi_{t2}}$, vers deux états de particules également dégénérés de Kramers avec $k_{p1}^{\pi_{p1}} = -k_{p1}^{\pi_{p1}} = -k_{p2}^{\pi_{p2}}$.

- ...
- les configurations $|npnh\rangle$ résultats d'excitations de n particules des états de trous $k_{t1}^{\pi_{t1}}, k_{t2}^{\pi_{t2}}, \dots$, et $k_{tn}^{\pi_{tn}}$ vers les états de particules $k_{p1}^{\pi_{p1}}, k_{p2}^{\pi_{p2}}, \dots$, et $k_{pn}^{\pi_{pn}}$. Ces excitations sont permises si :

$$K = \sum_{i=1,n} (k_{p_i} - k_{t_i})$$

$$\Pi = \prod_{i=1,n} \pi_{p_i} \pi_{t_i}.$$

Parmi les différents types d'excitations $|1p1h\rangle, |2p2h\rangle, |3p3h\rangle, \dots$ nous avons présenté sur la figure 2.1 certaines des excitations ($n \leq 2$) qui seront prises en compte dans notre étude.

2.2.4 Les troncations dans l'approche HTDA

La base à N corps qui contient toutes les excitations $|npnh\rangle$ rend la matrice du Hamiltonien très grande voire impossible à diagonaliser. Donc plusieurs troncatures sont nécessaires,

1. Une troncature porte sur les états individuels, qui sont jugés les plus importants pour le traitement des corrélations. Cette troncature est fixée par un paramètre X ($X > 0$), qui détermine que l'on retient tous les états individuels situés autour du niveau de Fermi ε_F , dans une fenêtre d'énergie $[\varepsilon_F - X, \varepsilon_F + X]$. Le paramètre X dépend du type de corrélations. Dans le cas des corrélations d'appariement, la valeur de X peut être typiquement comprise entre 6-12 MeV, mais dans le cas des corrélations vibrationnelles, le paramètre X doit être choisi plus grand, typiquement de l'ordre $X = 20-50$ MeV (*cf.* chapitre 3).

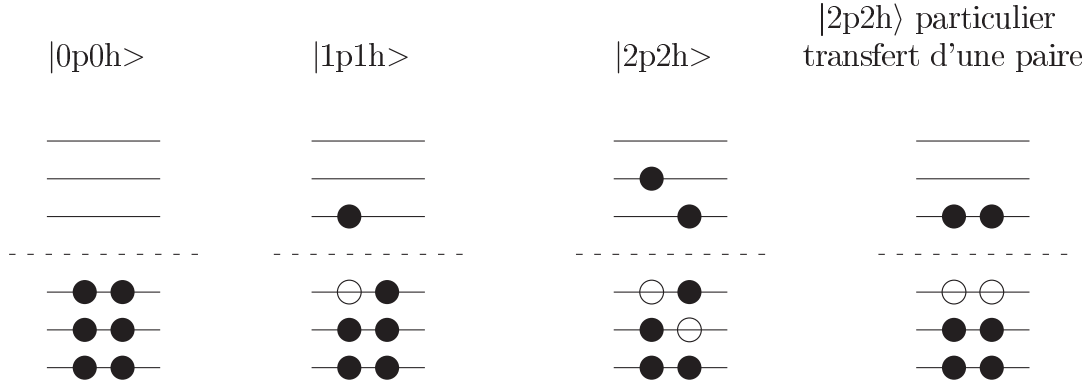


FIG. 2.1 – *Différentes excitations $|npnh\rangle$.*

Un facteur de coupure sur les états individuels a été utilisé après l'étude [31], il est défini par,

$$f_i^2 = \frac{1 + e^{\frac{-X}{\mu}}}{1 + e^{\frac{|\varepsilon_{\text{HF}}^i - \varepsilon_{\text{F}}| - X}{\mu}}}$$

où μ représente la largeur de la fonction f_i .

Les éléments de matrice d'interaction sont multipliés par ce facteur de coupure :

$$\langle ij|\hat{V}|\tilde{k}\tilde{l}\rangle' = f_i f_j f_k f_l \langle ij|\hat{V}|\tilde{k}\tilde{l}\rangle.$$

Son rôle est d'adoucir l'effet brusque de la coupure sur les états individuels qui se trouvent loin du niveau de Fermi, en incorporant seulement une partie. Il tend vers 0 pour les états individuels situés au delà de la fenêtre, et il vaut ~ 1 pour les états qui sont proche du niveau de Fermi.

2. Une troncature sur l'ordre des états à plusieurs corps est aussi nécessaire dans le traitement HTDA, à savoir que pour un traitement raisonnable de l'appariement on va se limiter aux excitations de type 1p-1h et 2p-2h. Parmi ces dernières excitations (2p2h) on ne gardera dans certains cas que les états de transfert d'une paire.

2.2.5 La symétrie par rapport au renversement du temps

L'opérateur \hat{T} de renversement du temps vérifie (*cf.* par exemple [48]) les relations suivantes,

$$\hat{T}^2 = (-1)^N, \quad \hat{T}^\dagger = (-1)^N \hat{T}.$$

N désignant le nombre de fermions (de spin demi-entier) que contient le système. Il en résulte :

- système de N fermions avec N pair

$$\hat{T}^2 = 1, \quad \hat{T} = \hat{T}^{-1} = \hat{T}^\dagger.$$

– système de N fermions avec N impair

$$\hat{T}^2 = -1, \quad \hat{T} = -\hat{T}^{-1} = -\hat{T}^\dagger.$$

Les états à N corps (2.17) des noyaux pairs-pairs ne sont pas en général des états pairs de l'opérateur renversement du temps \hat{T} , à l'exception par exemple du vide $|0p0h\rangle$ et des transferts de paires. On note enfin (*cf.* par exemple la référence [49]) que pour un système d'un fermion, on a

$$\hat{T}\hat{a}_k^\dagger\hat{T}^\dagger = \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger, \quad \hat{T}\hat{a}_{\bar{k}}^\dagger\hat{T}^\dagger = -\hat{a}_k^\dagger.$$

Il en résulte,

$$\hat{T}\hat{a}_k\hat{T}^\dagger = \hat{a}_{\bar{k}}, \quad \hat{T}\hat{a}_{\bar{k}}\hat{T}^\dagger = -\hat{a}_k.$$

Ces relations doivent être utilisées avec prudence quand on travaille dans l'espace de Fock, où le nombre de particules et donc sa parité ne sont pas définis. Nous étudierons les propriétés sous \hat{T} de nos états à plusieurs corps de la façon suivante.

L'opérateur renversement du sens du temps \hat{T} agissant sur un état produit $|\Psi\rangle$ est, de par sa structure, tel que

$$\hat{T}|\Psi\rangle = \prod_i (\hat{T}|\varphi_i\rangle)$$

Cette propriété est conservée lors de l'antisymétrisation éventuelle de $|\Psi\rangle$, puisqu'elle correspond à une combinaison linéaire des coefficients réels.

Supposons qu'on puisse partitionner l'espace des états à un corps en des états $|i\rangle$ qu'on appellera états positifs et en des états $|\bar{i}\rangle$, qu'on appellera états négatifs de telle sorte que $\forall i > 0$, les états $|\bar{i}\rangle$ appartiennent aux sous-espace des états négatifs. Ceci est réalisé, par exemple quand on a la symétrie axiale. Alors $|i\rangle$ sera dit positif si $k_i > 0$. On définira $sign(i)$ comme étant $+1$ ou -1 suivant que $|i\rangle$ est comme état positif ou négatif.

On va maintenant en déduire les propriétés sous renversement du sens du temps de nos états de base à plusieurs corps, dans le cas où N et Z sont pairs.

Cas du $|\Phi_0\rangle \equiv |0p0h\rangle$:

Puisque $|\Phi_0\rangle = \prod_{i(i>0)=1}^{\frac{A}{2}} (|\varphi_i\rangle|\varphi_{\bar{i}}\rangle)$, donc

$$\begin{aligned} \hat{T}|\Phi_0\rangle &= \prod_{i=1}^{\frac{A}{2}} sign(i)sign(\bar{i}) (|\varphi_{\bar{i}}\rangle|\varphi_i\rangle). \\ &= \prod_{i=1}^{\frac{A}{2}} (|\varphi_i\rangle|\varphi_{\bar{i}}\rangle) \quad \text{puisque } sign(i)sign(\bar{i}) = -1 \end{aligned}$$

Donc $|\Phi_0\rangle$ est pair par renversement du sens du temps.

Cas de $|\Phi_1\rangle \equiv |1p1h\rangle$:

L'état $|\Phi_1\rangle$ est égal, à une phase près à $\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_0\rangle$ (α état de particule, a état de trou), donc on aura

$$\hat{T}|\Phi_1\rangle = \text{sign}(\alpha)\text{sign}(a)\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_0\rangle \neq \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_0\rangle, \quad \forall \alpha, a$$

donc $\hat{T}|\Phi_1\rangle \neq |\Phi_1\rangle$.

Cas de $|\Phi_2\rangle \equiv |2p2h\rangle$:

L'état $|\Phi_2\rangle$ de même est égal à $\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_b \hat{a}_a |\Phi_0\rangle$, donc on aura

$$\hat{T}|\Phi_2\rangle = \text{sign}(\alpha)\text{sign}(\beta)\text{sign}(b)\text{sign}(a)\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_b \hat{a}_a |\Phi_0\rangle \neq \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_b \hat{a}_a |\Phi_0\rangle = |\Phi_2\rangle,$$

sauf si $\alpha = \bar{\beta}$ et $a = \bar{b}$, car dans ce cas

$\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_{\bar{\alpha}} \hat{a}_a = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_{\bar{\alpha}}^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_{\bar{a}}$ et $\text{sign}(\alpha)\text{sign}(\bar{\alpha}) = \text{sign}(a)\text{sign}(\bar{a}) = -1$. C'est le cas d'un transfert d'une paire.

Pour restaurer la symétrie suivant \hat{T} , nous avons construit à partir des états qui ne sont pas pairs par renversement du temps une nouvelle base contenant les états à N particules

$$|\Phi_i^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Phi_i\rangle \pm \hat{T}|\Phi_i\rangle] \quad (2.18)$$

En ne considérant que des noyaux pairs-pairs, nous ne devons considérer que des états $|\Phi_k^+\rangle$ tels que

$$\hat{T}|\Phi_i^+\rangle = |\Phi_i^+\rangle.$$

De cette façon, nous avons construit une nouvelle base d'états à N particules, qui est elle même paire par renversement du temps. Outre la nécessité théorique, que cette considération revêt, elle réduit la taille de la base à diagonaliser.

2.2.6 L'interaction delta

L'interaction résiduelle de portée nulle a permis de rendre compte de façon assez réaliste des propriétés nucléaires de nombreux noyaux dans un formalisme HF+BCS (cf. exemple [42]). Nous l'utilisons pour le traitement des corrélations d'appariement dans l'approche HTDA. Elle s'écrit sous la forme suivante [50] :

$$\hat{V}_\delta = \sum_{T=0,1} V_0^T \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\Pi}^S \hat{\Pi}^T.$$

où V_0 représente l'intensité de la force pour un canal (S, T) donné, et les opérateurs $\hat{\Pi}^S$ et $\hat{\Pi}^T$ sont des opérateurs de projection respectivement sur les états de bon spin S et bon isospin T , et qui sont définis à travers des opérateurs d'échange de spin (\hat{P}^σ) et d'isospin (\hat{P}^τ), par

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}^S &= \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} - (-1)^S \hat{P}^\sigma \right) \\ \hat{\Pi}^T &= \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} - (-1)^T \hat{P}^\tau \right). \end{aligned}$$

où

$$\hat{P}^\sigma = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad \hat{P}^\tau = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2)$$

Mais comme la force δ est paire dans l'échange des variables d'espace si $S=0, 1$, on aura $T=1, 0$ à cause du principe de Pauli.

L'interaction delta prend donc la forme suivante, dans les deux canaux,

$$\begin{aligned} S=0 \quad T=1, \quad \hat{V}_\delta &= \frac{1}{4}V_0^{T=1}(\mathbb{1} - \hat{P}^\sigma)(\mathbb{1} + \hat{P}^\tau)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ S=1 \quad T=0, \quad \hat{V}_\delta &= \frac{1}{4}V_0^{T=0}(\mathbb{1} + \hat{P}^\sigma)(\mathbb{1} - \hat{P}^\tau)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \end{aligned} \quad (2.19)$$

On en déduit que pour des états à deux nucléons neutron-neutron ou proton-proton qui ont $|T_z| = 1$ et donc $T = 1$, l'interaction \hat{V}_δ (paire pour sa partie espace) ne permet que l'appariement pour les états singulets de spin ($S = 0$). Pour des états à deux nucléons neutron-proton ($T_z = 0$), l'interaction delta permet à priori l'appariement dans les deux canaux $T=0$ et $T=1$.

2.2.7 Les éléments de matrice du Hamiltonien

Le calcul des éléments de matrice du Hamiltonien \hat{H} (2.15) entre les états pairs par renversement du temps (notés $|\Phi_i^+\rangle$ et $|\Phi_j^+\rangle$) dépend de la nature des états à N corps initiaux (notés $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_j\rangle$) qui ne sont pas en général pairs par renversement du sens du temps (sauf le vide et les transferts des paires). Les différentes possibilités du calcul de ces éléments sont,

- Si $\hat{T}|\Phi_i\rangle = |\Phi_i\rangle$ et $\hat{T}|\Phi_j\rangle \neq |\Phi_j\rangle$

$$|\Phi_i^+\rangle = |\Phi_i\rangle, \quad |\Phi_j^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\Phi_j\rangle + |\Phi_{\bar{j}}\rangle],$$

et l'élément de matrice \hat{H} s'écrit comme

$$\langle \Phi_i^+ | \hat{H} | \Phi_j^+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle + \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_{\bar{j}} \rangle \right].$$

- Si $\hat{T}|\Phi_j\rangle = |\Phi_j\rangle$ et $\hat{T}|\Phi_i\rangle \neq |\Phi_i\rangle$

$$|\Phi_i^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\Phi_i\rangle + |\Phi_{\bar{i}}\rangle], \quad |\Phi_j^+\rangle = |\Phi_j\rangle,$$

et l'élément de matrice \hat{H} s'écrit comme

$$\langle \Phi_i^+ | \hat{H} | \Phi_j^+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle + \langle \Phi_{\bar{i}} | \hat{H} | \Phi_j \rangle \right].$$

- Si $\hat{T}|\Phi_i\rangle = |\Phi_i\rangle$ et $\hat{T}|\Phi_j\rangle = |\Phi_j\rangle$

$$|\Phi_i^+\rangle = |\Phi_i\rangle, \quad |\Phi_j^+\rangle = |\Phi_j\rangle$$

et l'élément de matrice \hat{H} est trivialement

$$\langle \Phi_i^+ | \hat{H} | \Phi_j^+ \rangle = \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle.$$

- Si $\hat{T}|\Phi_i\rangle \neq |\Phi_i\rangle$ et $\hat{T}|\Phi_j\rangle \neq |\Phi_j\rangle$

$$|\Phi_i^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\Phi_i\rangle + |\Phi_{\bar{i}}\rangle], \quad |\Phi_j^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\Phi_j\rangle + |\Phi_{\bar{j}}\rangle]$$

et l'élément de la matrice \hat{H} s'écrit comme

$$\langle \Phi_i^+ | \hat{H} | \Phi_j^+ \rangle = \frac{1}{2} \left[\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle + \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_{\bar{j}} \rangle + \langle \Phi_{\bar{i}} | \hat{H} | \Phi_j \rangle + \langle \Phi_{\bar{i}} | \hat{H} | \Phi_{\bar{j}} \rangle \right].$$

D'après l'équation (2.15) on trouve

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{H}_{\text{HF}} | \Phi_j \rangle - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle \delta_{ij} + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle. \quad (2.20)$$

Les éléments de matrice d'un Hamiltonien défini par l'équation (2.14) peuvent se mettre, sous la forme suivante,

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = (\langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + E_{\text{p-h}}^i) \delta_{ij} + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle. \quad (2.21)$$

où

$$E_{\text{p-h}}^i = \langle \Phi_i | \hat{H}_{\text{IQP}} | \Phi_i \rangle = \sum_{\text{p}} \varepsilon_{\text{p}}^i - \sum_{\text{h}} \varepsilon_{\text{h}}^i$$

est l'énergie d'excitation particule-trou de l'état $|\Phi_i\rangle$ relative à $|\Phi_0\rangle$, qui contribuent seulement dans les éléments diagonaux.

Puisque

$$\hat{H}_{\text{IQP}} = \sum_i \varepsilon_i : \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i := \sum_i \varepsilon_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i})$$

où la sommation porte sur tous les états HF, donc

$$\hat{H}_{\text{IQP}} = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_i^{\text{h}} \varepsilon_i = \sum_i^{\text{p}} \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_i^{\text{h}} \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_i^{\text{h}} \varepsilon_i$$

d'où on obtient,

$$\hat{H}_{\text{IQP}} = \sum_i^{\text{p}} \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_i^{\text{h}} \varepsilon_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 1) = \sum_i^{\text{p}} \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_i^{\text{h}} \varepsilon_i \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger.$$

On constate à partir des équations (2.20) et (2.21), que le calcul des éléments de \hat{H} implique le calcul des éléments de V_{res} entre les états à N particules. Dans ce qui suit nous allons résumer le résultat détaillé dans l'annexe D.1 du calcul de ces éléments, en séparant le cas diagonal et le cas non diagonal.

Les éléments diagonaux

Dans ce cas $|\Phi_i\rangle = |\Phi_j\rangle$, et l'équation (2.21) devient,

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + E_{p-h}^i + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_i \rangle.$$

d'après l'équation (D.5) on a

$$\langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_i \rangle = \left[\sum_{k<l}^t + \sum_{k<l}^p - \sum_k^t \sum_l^p \right] \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle.$$

où les sommations notées t ou p portent sur les états de trous ou de particules de $|\Phi_i\rangle$ par rapport à $|\Phi_0\rangle$ respectivement.

Nous obtenons les éléments diagonaux de l'Hamiltonien \hat{H} comme

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_i \rangle = H_{00} + E_{p-h}^i + \left[\sum_{k<l}^t + \sum_{k<l}^p - \sum_k^t \sum_l^p \right] \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle,$$

où $H_{00} = \langle \Phi_0 | \hat{H}_{\text{HF}} | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle$, puisque $\langle \Phi_0 | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_0 \rangle = 0$.

Les éléments non diagonaux

L'interaction résiduelle étant constituée d'opérateurs à un et deux corps, les éléments de matrice H_{ij} sont nuls si $|\Phi_i\rangle$ diffère de $|\Phi_j\rangle$ par plus de deux états à un nucléon. On considère donc les deux cas suivants :

-Les états $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_j\rangle$ diffèrent par une particule

Si $|\Phi_i\rangle$ diffère de $|\Phi_j\rangle$ par un nucléon, on a par exemple si $|\Phi_j\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_i\rangle$. (dans ce qui suit, nous considérons arbitrairement pour l'écriture des équations que cette phase est +1). D'après les équations (2.21) et (D.8) nous obtenons

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle = \left[\sum_k^p - \sum_k^t \right] \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle.$$

-Les états $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_j\rangle$ diffèrent par deux particules

Dans ce cas, à une phase près $|\Phi_j\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b |\Phi_i\rangle$, et d'après l'équation (D.11), on a

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle = \langle ab | \hat{v} | \widetilde{\beta\alpha} \rangle.$$

2.2.8 Diagonalisation

Puisque l'Hamiltonien \hat{H} est composé d'une constante E_{HF} indépendante de la base d'état à N particules et d'un Hamiltonien hermitique \hat{H}' tel que

$$\hat{H}' = \hat{H}_{\text{IQP}} + \hat{V}_{\text{res}}.$$

2.2 L'Approche HTDA

Dans ce cas la diagonalisation de \hat{H} conduit à la diagonalisation de \hat{H}' . La matrice de l'opérateur \hat{H}'

$$\langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle = E_{p-h}^i \delta_{ij} + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle,$$

est symétrique (car les éléments de matrice sont réels) et s'écrit sous la forme

$$\begin{pmatrix} H'_{00} & H'_{01} & H'_{02} & \cdots \\ H'_{10} & H'_{11} & H'_{12} & \cdots \\ H'_{20} & H'_{21} & H'_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

avec $H'_{ij} = \langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle$ et $H'_{ij} = H'_{ji}$.

Le code utilisé pour diagonaliser la matrice de Hartree-Fock [8, 9] n'est pas adapté dans le cadre de nos calculs HTDA, car la taille de la base à diagonaliser est beaucoup plus grande par rapport à celle de HF (de plusieurs ordre de grandeur). De plus nous ne sommes pas intéressés par tout le spectre, mais seulement par les états propres les plus bas en énergie. C'est pourquoi, nous avons utilisé un code [51] basé sur la méthode de Lanczos [52]. Nous l'avons utilisé pour diagonaliser de grandes matrices symétriques, typiquement d'ordre (10000×10000) , dans le cas où les corrélations neutron-proton ne sont pas considérées.

L'état propre d'HTDA le plus bas par diagonalisation est l'état corrélé $|\Psi\rangle$, qui est un ensemble des déterminants de Slater, il se décompose sur les états à N particules

$$|\Psi\rangle = \sum_i \chi_i |\Phi_i\rangle = \chi_0 |\Phi_0\rangle + \sum_{|1p1h\rangle} \chi_1 |\Phi_1\rangle + \sum_{|2p2h\rangle} \chi_2 |\Phi_2\rangle + \dots \quad (2.22)$$

Le carré des coefficients réels χ_i représente la probabilité que le système se trouve dans l'état à N particules $|\Phi_i\rangle$, avec la condition qui assure la normalisation de l'état corrélé $|\Psi\rangle$, soit

$$\sum_i \chi_i^2 = 1.$$

L'énergie propre la plus basse par diagonalisation, est une valeur qui est due d'une part aux corrélations et d'autre part à une énergie d'excitation particule-trou. L'énergie totale E_{HTDA} du système est par définition la valeur moyenne de \hat{H} pour l'état corrélé $|\Psi\rangle$,

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E_{\text{HTDA}}.$$

L'énergie de corrélations E_{corr} est la différence de la valeur moyenne de l'Hamiltonien \hat{H} pour l'état corrélé (E_{HTDA}) et sa valeur moyenne dans le vide $|\Phi_0\rangle$,

$$E_{\text{corr}} = E_{\text{HTDA}} - \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle, \quad (2.23)$$

En premier lieu nous allons traiter séparément les neutrons et les protons, c'est à dire que notre solution sera le produit direct d'une solution proton avec une solution neutron. Dans ce cas cette énergie correspond à l'énergie de corrélation E_{corr} pour neutrons-neutrons et protons-protons.

2.2.9 Mesure de la diffusivité de la surface de Fermi

Pour décrire le phénomène de l'appariement dans le formalisme HTDA, il est utile de définir une quantité qui caractérise cette intensité. Une observable liée à la diffusivité de la surface de Fermi, peut être définie par,

$$S = \text{Tr}(\rho^{\frac{1}{2}}(1 - \rho)^{\frac{1}{2}}) = \sum_i u_i v_i,$$

où v_i et u_i représentent respectivement les amplitudes de probabilité d'occupation et d'inoccupation d'un état à une particule (avec $u_i^2 + v_i^2 = 1$). Elles sont définies à partir de la matrice densité réduite $\hat{\rho}$ dans la base canonique (où celle-ci est diagonale) par

$$v_i = \sqrt{\rho_{ii}} \quad u_i = \sqrt{1 - \rho_{ii}} = \sqrt{1 - v_i^2}.$$

En l'absence de corrélations cette observable est nulle, mais elle augmente avec la diffusivité de la surface de Fermi.

2.2.10 La valeur moyenne des opérateurs à un corps

Le calcul de la valeur moyenne des quantités physiques tel que le rayon, le moment quadrupolaire ou hexadécapolaire, dans l'état corrélé $|\Psi\rangle$ est effectué dans le cadre de la seconde quantification, où un opérateur à un corps $\hat{\Theta}$ est défini (voir annexe A pour les notations) par :

$$\hat{\Theta} = \sum_{m,n} \langle m|\hat{\theta}|n\rangle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n,$$

où la sommation porte sur tous les états d'une base quelconque à un corps.

La valeur moyenne de cet opérateur dans l'état corrélé $|\Psi\rangle$ de (2.22) est donnée par

$$\langle \Psi|\hat{\Theta}|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \chi_i \chi_j \langle \Phi_i|\hat{\Theta}|\Phi_j\rangle.$$

Pour le calcul des termes $\langle \Phi_i|\hat{\Theta}|\Phi_j\rangle$ nous allons considérer séparément le cas diagonal et le cas non diagonal.

Cas des éléments diagonaux

À l'aide du théorème de Wick faible généralisé (cf. l'annexe A) on a

$$\begin{aligned} \langle \Phi_i|\hat{\Theta}|\Phi_i\rangle &= \sum_{m,n} \langle m|\hat{\theta}|n\rangle \langle \Phi_i|\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n|\Phi_i\rangle = \sum_{m,n} \langle m|\hat{\theta}|n\rangle \delta_{mn}^{T(\Phi_i)} \\ &= \sum_n^{T(\Phi_i)} \langle n|\hat{\theta}|n\rangle, \end{aligned}$$

où la sommation porte sur tous les états occupés de $|\Phi_i\rangle$.

Cas des éléments non diagonaux

Dans ce cas, l'élément de matrice ne sera non-nul que pour deux états $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_j\rangle$, qui ne diffèrent que pour l'état d'un nucléon, de telle sorte que (à une phase près)

$$|\Phi_j\rangle = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l |\Phi_i\rangle.$$

En utilisant les contractions définies dans l'annexe A, nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle \Phi_i | \hat{\Theta} | \Phi_j \rangle &= \sum_{m,n} \langle m | \hat{\theta} | n \rangle \langle \Phi_i | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l | \Phi_i \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle m | \hat{\theta} | n \rangle \delta_{ml}^{T(\Phi_i)} \delta_{nk}^{P(\Phi_i)} \\ &= \langle l | \hat{\theta} | k \rangle. \end{aligned}$$

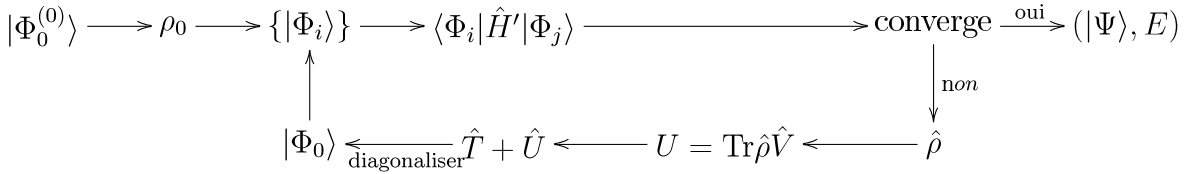
où les notations $\delta_{ml}^{T(\Phi_i)}$, ou $\delta_{nk}^{P(\Phi_i)}$ signifient que l'état m doit être égale à l'état l et l'état n doit être égale à l'état k , et doivent être respectivement des états de trous (pour m) ou de particules (pour n).

2.2.11 Calcul auto-cohérent

Le processus HF auto cohérent, ou un calcul auto cohérent de type HF+BCS, nous fournit un champ moyen et donc un déterminant de Slater $|\Phi_0^{(0)}\rangle$, qui est l'état de référence. À partir de ce dernier, nous contruisons une base d'états à N particules $\{|\Phi_i\rangle\}$ résultat d'excitation particules-trous sur le vide $|\Phi_0^{(0)}\rangle$. Le calcul et la diagonalisation des éléments de matrice, nous donne le fondamental corrélé $|\Psi\rangle$ d'énergie E .

On peut faire converger le processus HTDA en l'arrêtant, quand la différence pour E , Q_{20} et Q_{40} entre les deux dernières itérations est inférieure à une certaine limite, par exemple référence à 10^{-6}MeV , $10^{-2}b$ et $10^{-2}b^2$ respectivement.

L'approche correspondante est illustrée dans ce diagramme.



À partir d'un état corrélé $|\Psi\rangle$ on calcule la matrice densité réduite à un corps $\hat{\rho}$. Cette dernière nous permet d'obtenir un nouveau champ moyen U correspondant à la matrice densité $\hat{\rho}$, qui est la réduction à un corps de l'interaction effective \hat{V} à deux corps. La diagonalisation de l'Hamiltonien $\hat{H}_{\text{HF}} = \hat{T} + \hat{U}$ nous fournit un nouveau vide $|\Phi_0\rangle$, à partir duquel on construit une nouvelle base d'états à N particules. On en déduit un nouveau état corrélé $|\Psi\rangle$, à partir duquel on peut définir une nouvelle matrice densité réduite associée à $|\Psi\rangle$, et ainsi de suite jusqu'à la convergence.

On notera que la méthode HTDA auto-cohérente converge en général rapidement, dans la mesure où elle dépend d'un vide $|\Phi_0\rangle$ choisi, qui contient déjà des caractéristiques physiques assez réalistes.

Chapitre 3

LES CORRÉLATIONS VIBRATIONNELLES

Une description complète de la structure nucléaire se doit de tenir compte des corrélations au delà de l'approximation de Hartree-Fock. L'appariement est une de ces corrélations, sans doute la plus importante.

La deuxième classe de corrélations vient du couplage du mouvement des nucléons aux oscillations collectives du champ moyen. Deux méthodes principales ont permis de traiter ce type de corrélations à partir de la théorie du champ moyen : la RPA (Random Phase Approximation) [37] et la GCM (Méthode de Coordonnée Génératrice) [53, 54]. La RPA est adaptée à la description du mouvement des nucléons à petite amplitude, alors que la GCM permet une description de ce mouvement collectif à grande amplitude.

Ces deux types de corrélations (appariement et vibrationnelles) jouent un rôle important dans l'interprétation de la structure des noyaux stables et exotiques. La plupart des techniques utilisées pour inclure ces corrélations souffrent de la non conservation du nombre de particules (cas de BCS ou HFB), et même incapable de décrire les régimes de faible appariement (PBCS) [1]. D'autre part, la RPA basée sur l'approximation quasi-bosonique viole le principe de Pauli. En d'autres termes, les relations de commutation de bosons ne sont pas satisfaites, si on tient compte de leurs sous structures fermioniques. Les auteurs de la référence [55] ont proposé une extension de la RPA "Renormalized RPA", qui n'utilise pas l'approximation quasi-bosonique.

Dans notre cas, l'approximation HTDA a été proposée (comme on a vu au chapitre 2) pour traiter les corrélations d'appariement dans le fondamental et les états excités, avec conservation du nombre de particules. On va l'utiliser dans ce chapitre, pour traiter une partie des corrélations vibrationnelles, évidemment sans violation du principe de Pauli, le fait d'utiliser les déterminants de Slater.

3.1 Historique

L'approximation RPA ou l'approximation des phases aléatoires est une méthode microscopique pour décrire la réponse des noyaux, sous l'effet de faibles perturbations externes. Cette théorie des états excités du noyau, admet la possibilité que l'état fondamental n'ait pas un caractère de particules indépendantes, mais puisse contenir des corrélations.

Historiquement (voir par exemple la référence [37]), la RPA a été développée par *Bohm* et *Pines* (1953), pour décrire les oscillations de plasma dans un gaz d'électrons.

Des équations de mouvement plus simples ont été dérivées et développées par *Sawada* (1957) et collaborateurs. La première application de la RPA en physique nucléaire a été effectuée par *Ferrel* (1957) dans le cadre de la théorie de TDHF (Time Dependent HF) harmonique, pour étudier les vibrations monopolaires du noyau ^{16}O .

Des traitements plus complets de la RPA, dans le contexte nucléaire ont été effectués par *Baranger* (1960), *Sawicki* (1961) et *Thouless* (1961).

Depuis que cette méthode existe ainsi que son extension, la QRPA (Quasiparticle Random Phase Approximation), en incluant l'appariement, de nombreux groupes se sont lancés dans ce type de calculs basés sur le modèle du champ moyen, avec les interactions de Skyrme [56, 57, 17, 58], ou de Gogny [59, 60, 61, 62, 63], ainsi que ceux basés sur l'approche du champ moyen relativiste [64, 65].

Plusieurs faits expérimentaux ont été reproduits dans le cadre de la RPA, concernant plusieurs modes collectifs, appelés les résonances géantes multipolaires.

3.2 Les résonances géantes

Le noyau est un système de N particules, où les nucléons se trouvent en mouvement dans un potentiel du champ moyen. Ils interagissent en plus au travers d'une interaction résiduelle. Il est évident que ce système de nucléons a des états excités correspondant à des excitations d'une ou quelques particules. Ce mode d'excitation est bien connu près des couches fermées. Il y a un autre mode d'excitation, où beaucoup de nucléons participent d'une manière cohérente [66]. Un tel mode d'oscillations collectives ont été observées dans les noyaux, et de façon similaire dans un système d'électrons, ce sont les résonances géantes.

Elles ont été découvertes en 1947 [67] et interprétées comme une signature des mouvements collectifs des nucléons à l'intérieur des noyaux. Elles ont été observées dans les noyaux stables sur toute la table de masse dans les années 50. Ces modes explorent seulement les oscillations de petite amplitude autour de l'état fondamental. Pour cette raison elles sont décrites dans le cadre de la RPA. L'étude de ces résonances nous permet de tirer des conclusions importantes sur la structure des noyaux et en particulier : les modes d'excitation nucléaire collective, la compressibilité de la matière nucléaire [59], la structure en bulles éventuelle de certains noyaux tels ^{146}Ar [68].

Plusieurs types de résonances (*cf.* figure 3.1 extraite de la référence [69]) ont été distinguées selon leurs nombres quantiques : moment angulaire J , parité π et isospin T . Nous allons passer en revue les modes de vibrations nucléaires les plus importants.

3.2.1 La résonance dipolaire $E1$

C'est la première identifiée, découverte en 1948 par *Goldhaber et Teller* [70]. Elle consiste principalement en d'excitations de type $1\hbar\omega$ [71]. Dans ce mode les oscillations

collectives des neutrons sont en opposition de phase avec celles des protons caractérisé par les nombres quantiques ($J^\pi = 1^-, T = 1$) (voir référence [72] pour plus de détail sur ce type de résonance).

Expérimentalement l'état résonant $E1$ est révélé par la photoabsorption. Son énergie varie de ~ 22 MeV dans les noyaux légers à ~ 12 MeV dans les noyaux lourds, et sa largeur est de l'ordre de 6 MeV [38].

3.2.2 La résonance quadrupolaire $E2$

Elle est observée presque sur toute la table des isotopes [73] mise en évidence. Elle a été discutée d'un point de vue théorique par *Bohr et Mottelson* en 1953 [74], et expérimentalement en 1971-1972 [75, 76]. Dans ce mode la distribution cohérente des nucléons ($J^\pi = 2^+, T = 0$) induit une déformation oscillante du noyau (*cf.* voir figure 3.2 extraite de la référence [77]). Autrement, la vibration des neutrons en phase avec celle des protons conduit à un changement de la forme sphérique à une forme ellipsoïdale et l'inverse. Son énergie est plus faible que celle de la résonance géante dipolaire. D'un point de vue systématique, son énergie vaut dans le cas isoscalaire

$$E \simeq 60 - 66A^{-\frac{1}{3}}(\text{MeV})$$

et dans le cas isovecteur est de l'ordre de

$$E \simeq 130A^{-\frac{1}{3}}(\text{MeV}).$$

Le moyen le plus utilisé expérimentalement pour exciter de telles vibrations est la diffusion inélastique d'électrons, et des particules comme protons, deutérium et les particules α [78]. Elle est caractérisée par des excitations de type $2\hbar\omega$, et son énergie est liée à la masse effective isoscalaire [79, 80].

3.2.3 La résonance monopolaire $E0$

Dans ce mode ($J^\pi = 0^+, T = 0$) le mouvement cohérent des nucléons peut se représenter comme une « respiration » du noyau autour de son état d'équilibre. Elle correspond en effet, à un mode de dilatation et de compression. Elle a été observée expérimentalement par les travaux de la référence [81] et par plusieurs autres. Son énergie d'excitation qui est de l'ordre de

$$E \simeq 80A^{-\frac{1}{3}}(\text{MeV}),$$

est une mesure directe de l'incompressibilité de la matière nucléaire [59]. Cette dernière est un ingrédient important non seulement dans la description des noyaux finis, mais aussi dans l'étude des collisions des ions lourds, des supernovae et des étoiles à neutrons.

En général, on peut remarquer ces différents modes vibrationnels ($E0, E1, E2$) ont des énergies varient comme $\propto A^{-\frac{1}{3}}$. Ceci est lié à la distance d'énergie entre les couches majeures qui varie comme $\hbar\omega \propto A^{-\frac{1}{3}}$.

D'autres modes d'excitations découverts après le développement des recherches dans les noyaux riches en neutrons, comme les résonances dipolaires « molles » dans les noyaux à halo de neutrons, et les résonances de pygmées dans les noyaux à peau de neutrons.

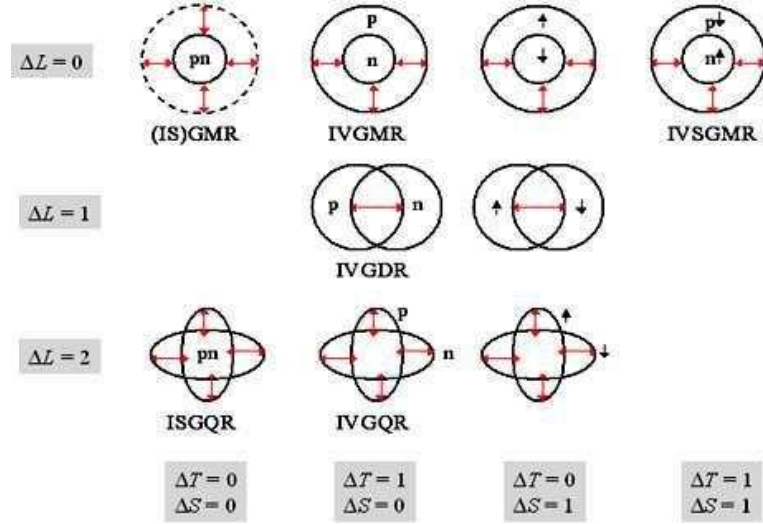


FIG. 3.1 – Les différentes résonances multipolaires

Nos travaux ont été consacrés à l'étude de la résonance géante quadrupolaire isoscalaire (RGQIS).

3.3 Les règles de somme

Les règles de somme forment un moyen très important dans la théorie des excitations collectives. Elles fournissent un moyen de mesure utile pour des calculs quantitatifs du degré de collectivité d'un état excité. Dans la plupart des cas elles permettent de calculer les propriétés globales dans une approche simple, comme elles sont utiles pour tester différents schémas d'approximations. Elles fournissent une analyse des excitations collectives en général, et en particulier des résonances géantes à partir de la réponse en fonction de l'énergie d'un système soumis à un champ ou une perturbation externe caractérisée par un opérateur hermitique à un corps \hat{Q} donné. Cette quantité est mesurée par la distribution de l'intensité,

$$S_Q(E) = \sum_n |\langle n | \hat{Q} | 0 \rangle|^2 \delta(E_n - E_0 - E) \quad (3.1)$$

qui représente la réponse de l'état fondamental des noyaux à l'action d'un opérateur physique arbitraire \hat{Q} (comme par exemple le moment multipolaire \hat{Q}_0), où $|0\rangle$ et $|n\rangle$ sont les états corrélés fondamental et excités, $E_n - E_0$ est l'énergie d'excitation, et $\langle n | \hat{Q} | 0 \rangle$ est l'amplitude de transition du fondamental à l'état excité.

Elle permet de qualifier un état de très collectif, dans la mesure où la fonction (3.1) donne alors un pic très prononcé à l'énergie correspondante. On définit le moment d'ordre k (entier) de la fonction (3.1) par (voir le calcul détaillé dans la référence [82]),

$$m_k = \int_0^\infty E^k S_Q(E) dE = \sum_n |\langle n | \hat{Q} | 0 \rangle|^2 (E_n - E_0)^k. \quad (3.2)$$

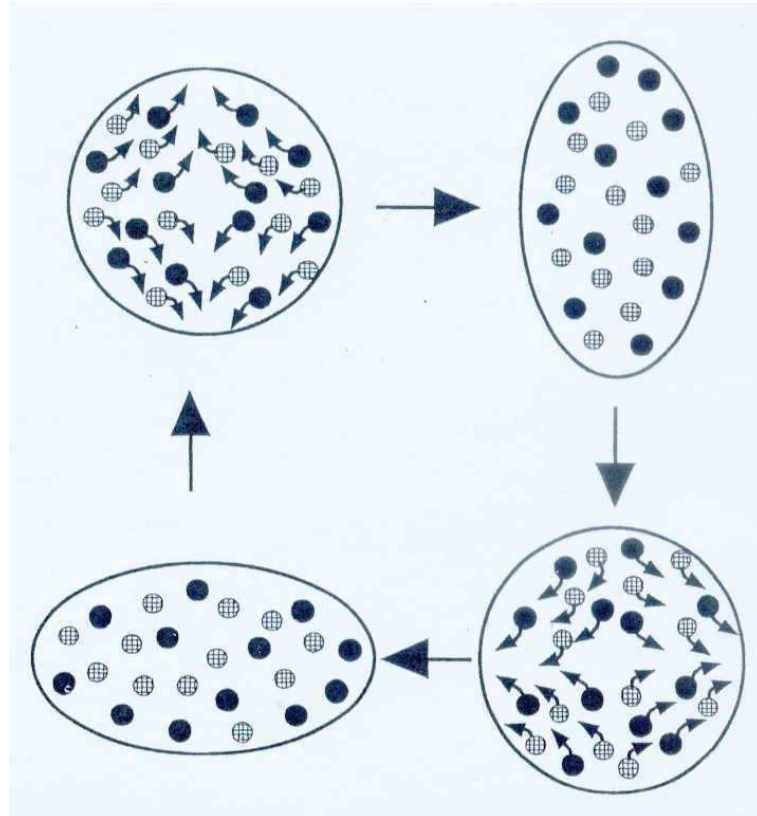


FIG. 3.2 – Représentation schématique de la RGQIS, où la distribution des nucléons induit un changement de la forme du noyau.

En utilisant la relation de fermeture $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$, on trouve

$$m_k = \langle 0 | \hat{Q} (\hat{H} - E_0)^k \hat{Q} | 0 \rangle, \quad (3.3)$$

où on a supposé que \hat{Q} est tel que $\langle 0 | \hat{Q} | 0 \rangle = 0$.

3.4 L'évaluation des moments m_k

Les moments d'ordre $k=0, 1$ sont caractérisés par leurs indépendance ou dépendance de l'énergie. Pour cela, Ils sont appelés respectivement, NEWSR (Non-Energy-Weighted Sum Rule) et EWSR (Energy-Weighted Sum Rule). Ils sont déterminés à partir des équations (3.2) et (3.3), et sont égaux aux quantités suivantes,

$$\begin{aligned} k=0 \quad m_0 &= \sum_n |\langle n | \hat{Q} | 0 \rangle|^2 = \langle 0 | \hat{Q}^2 | 0 \rangle. \\ k=1 \quad m_1 &= \sum_n |\langle n | \hat{Q} | 0 \rangle|^2 (E_n - E_0) = \frac{1}{2} \langle 0 | [\hat{Q}, [\hat{H}, \hat{Q}]] | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

On a de même pour

$$k=2 \quad m_2 = \sum_n |\langle n | \hat{Q} | 0 \rangle|^2 (E_n - E_0)^2 = -\langle 0 | [\hat{H}, \hat{Q}] [\hat{H}, \hat{Q}] | 0 \rangle.$$

De façon générale on a d'après [82]

$$m_k = (-1)^t (i)^k \langle 0 | \hat{Q}_s \hat{Q}_t | 0 \rangle \quad \text{avec,} \quad \hat{Q}_s = [\hat{H}, [\hat{H}, \dots, [\hat{H}, \hat{Q}] \dots]].$$

où s est le nombre de fois où \hat{H} apparaît dans l'expression de \hat{Q}_s . D'autre part s et t sont des entiers arbitraires avec $s + t = k$.

Lorsque \hat{Q} est un moment à une particule isoscalaire, dépendant seulement des coordonnées spatiales.

$$\hat{Q} = \sum_k \hat{Q}(r_k)$$

et si les interactions ne dépendent pas explicitement du moment des particules, alors

$$[\hat{Q}, \hat{H}] = [\hat{Q}, \hat{T}],$$

seul l'opérateur énergie cinétique \hat{T} contribue au commutateur.

Le moment m_1 (EWSR), est d'une importance spéciale, car il est lié à la section efficace totale d'absorption d'un photon [1, 83],

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_n \int_0^\infty dE \sigma_n(E) = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar c} m_1.$$

3.5 L'énergie et la largeur des résonances

où en pratique, la borne supérieure de l'intégrale est bornée pour éviter de prendre en compte de nouveaux mécanismes d'excitation à haute énergie (excitations des degrés de liberté hadronique).

D'autre part, il peut être réduit à partir des opérateurs d'un corps (voir ce qui suit), ce qui peut être calculé plus facilement. Dans ce cas on peut exprimer les moments d'ordre 1 (3.4) pour différents modes multipolaires,

– mode monopolaire $l = 0$ $\hat{Q} = (x^2 + y^2 + z^2)$ (cf. Annexe E.5)

$$m_1(l = 0) = \frac{2\hbar^2}{m} A \langle r^2 \rangle$$

– mode quadrupolaire $l = 2$ $\hat{Q} = (2z^2 - x^2 - y^2)$ (cf. Annexe E.5 pour le calcul détaillé, et la référence [84])

$$m_1(l = 2) = \frac{4\hbar^2}{m} A \left(\langle r^2 \rangle + \frac{\langle Q \rangle}{2} \right). \quad (3.5)$$

On remarque, que ces règles de somme sont écrites simplement comme la valeur moyenne d'opérateurs à un corps dans l'état fondamental. Ceci permet de calculer le pourcentage des règles de somme, qui est le rapport entre les résultats de (3.5) et le moment m_1 de l'équation (3.4).

3.5 L'énergie et la largeur des résonances

Théoriquement, l'évaluation des moments m_k d'ordre k (3.2), nous permet d'acquérir des informations sur des énergies liées à la résonance géante, qu'on peut définir comme suit [67]

$$E_k = \sqrt{\frac{m_k}{m_{k-2}}}. \quad (3.6)$$

Ces énergies satisfont à l'inégalité de Schwartz [82],

$$\left[\int f(E)^2 E^k S(E) dE \right] \left[\int g(E)^2 E^k S(E) dE \right] \geq \left(\int f(E) g(E) E^k S(E) dE \right)^2,$$

Nous avons donc pour $f(E) = 1$ et $g(E) = \frac{1}{E}$,

$$m_k m_{k-2} \geq m_{k-1}^2. \quad (3.7)$$

Et puisque les moments m_k sont positifs, on peut déduire de l'équation (3.7) que

$$\frac{m_k}{m_{k-1}} \geq \frac{m_{k-1}}{m_{k-2}}, \quad (3.8)$$

$$\sqrt{\frac{m_k}{m_{k-2}}} \geq \frac{m_{k-1}}{m_{k-2}}, \quad (3.9)$$

et

$$\frac{m_k}{m_{k-1}} \geq \sqrt{\frac{m_k}{m_{k-2}}}. \quad (3.10)$$

De l'ensemble des équations (3.8), (3.9) et (3.10), on déduit les inégalités

$$\dots \geq \sqrt{\frac{m_{k+1}}{m_{k-1}}} \geq \frac{m_k}{m_{k-1}} \geq \sqrt{\frac{m_k}{m_{k-2}}} \geq \frac{m_{k-1}}{m_{k-2}} \geq \dots \quad (3.11)$$

Les quantités ci-dessus correspondent respectivement aux énergies E_k définies par l'équation (3.6), et aux énergies qui sont comprises entre E_k et E_{k+1} ,

$$\bar{E}_k = \frac{m_k}{m_{k-1}},$$

La valeur moyenne correspond à

$$\bar{E} = \frac{\int E S(E) dE}{\int S(E) dE} = \frac{m_1}{m_0}.$$

L'ensemble des moments m_k satisfont d'après la référence [82] à la relation suivante,

$$\det \begin{vmatrix} m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_n \\ m_1 & m_2 & m_3 & \dots & m_{n+1} \\ \vdots & & & & \\ m_n & m_{n+1} & m_{n+2} & \dots & m_{2n} \end{vmatrix} > 0 \quad \text{pour } n = 0, 1, \dots$$

Pour $n = 0$, on obtient $m_0 = \langle 0|Q^2|0 \rangle > 0$.

Pour $n = 1$, nous obtenons

$$\Gamma^2 = \frac{m_2}{m_0} - \left(\frac{m_1}{m_0} \right)^2 > 0. \quad (3.12)$$

Or Γ^2 peut être obtenue autrement. Elle équivaut à la moyenne des carrés moins le carré de la moyenne

$$\begin{aligned} \Gamma^2 &= \frac{\int E^2 S(E) dE}{\int S(E) dE} - \left(\frac{\int E S(E) dE}{\int S(E) dE} \right)^2 \\ &= \frac{m_2}{m_0} - \left(\frac{m_1}{m_0} \right)^2. \end{aligned}$$

C'est donc la carré de la variance.

À partir de la définition de la fluctuation de la racine moyenne $E_2^2 - \bar{E}^2 \leq \frac{1}{4}(E_3^2 - E_1^2)$, on obtient

$$0 \leq \Gamma^2 \leq \frac{1}{4} \left(\frac{m_3}{m_1} - \frac{m_1}{m_{-1}} \right) = \Gamma_{\max}^2.$$

Un exemple d'application de ces inégalités, peut être trouvé dans les résultats de la référence [54] obtenus à l'aide des règles de somme évaluées dans le cadre de la coordonnée génératrice.

3.6 Le formalisme RPA

L'approximation de Tamm Dancoff (TDA) dans sa version usuelle, présentée par exemple dans les références [1, 37] implique que les corrélations qui sont le résultat des

excitations de type 1p1h sont incluses seulement dans les états excités. Le fondamental est donc considéré arbitrairement comme un état de HF qui ne contient pas de corrélations. Ce défaut a été résolu dans le cadre de la RPA, comme on va le voir, en incluant des corrélations dans le fondamental et en se limitant aux excitations 1p1h.

Rien n'interdit à l'approximation TDA dans une approximation plus correcte (limitation aux seules excitations 1p1h) d'inclure également des corrélations dans l'état fondamental. L'approche HTDA est une extension de la version correcte précédente de TDA, qui consiste à aller au delà des excitations 1p1h. Dans le cas où on se limite à des excitations de type 1p1h, HTDA peut être considérée comme incluant la RPA, car dans ce cas, les états fondamental $|0\rangle$ et excités $|\nu\rangle$ contiennent naturellement des corrélations, de telle sorte

$$\begin{aligned} |0\rangle &\simeq C_0^0 |HF\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^0 \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_i |HF\rangle \\ |\nu\rangle &\simeq C_0^\nu |HF\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^\nu \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_i |HF\rangle \end{aligned}$$

Dans le cadre de la RPA, l'opérateur d'excitation d'un mode vibrationnel comporte une partie particule-trou (*ph*) et une partie trou-particule (*hp*) [1, 37]. Il est défini par

$$\hat{O}_\lambda^\dagger = \sum_{mi} \left[X_{mi}^\lambda \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_i - Y_{mi}^\lambda \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m \right]$$

où la sommation porte sur les états occupés (*i*) (particules) et les états inoccupés (*m*) (trous), et les éléments des matrices X_{mi}^λ et Y_{mi}^λ représentent les densités de transition de telle sorte

$$\begin{aligned} X_{mi}^\lambda &= \langle 0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m | \lambda \rangle \\ Y_{mi}^\lambda &= \langle 0 | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_i | \lambda \rangle \end{aligned}$$

La différence entre la RPA et la TDA (traditionnelle non correcte) vient du deuxième terme, qui tient compte des corrélations dans l'état fondamental. En effet ce dernier terme n'intervient pas si on considère un état non corrélé comme l'état de HF. Mais si l'état contient des corrélations (la probabilité d'occupation autour de Fermi < 1), cela conduit non seulement à dépeupler l'état du quasi-vide mais aussi à le repeupler. Ce qui est le cas dans HTDA (ou sa limite TDA correcte), où la résolution de l'équation séculaire permet de considérer tous ces cas possibles.

Une autre différence, vient du fait que EWSR (m_1) sont violés dans TDA, qui sont conservés dans la RPA [1, 83]. Alors que dans HTDA les règles de somme ne sont pas conservées à cause de la non complétude de la base d'états.

La violation du principe de Pauli est un défaut majeur dans la RPA, à cause de «l'approximation quasi-bosonique» (*cf.* introduction). Cependant l'approche HTDA est différente de l'approximation RPA, où on n'utilise pas les mêmes équations. Pour cela, le principe de Pauli est toujours conservé dans notre approche.

Notre approche permet donc non seulement de traiter la RPA mais d'aller au delà de la RPA, comme par exemple la QRPA ou la SRPA, en tenant compte de l'appariement entre les quasiparticules ou prendre au delà des excitations de type 1p1h respectivement.

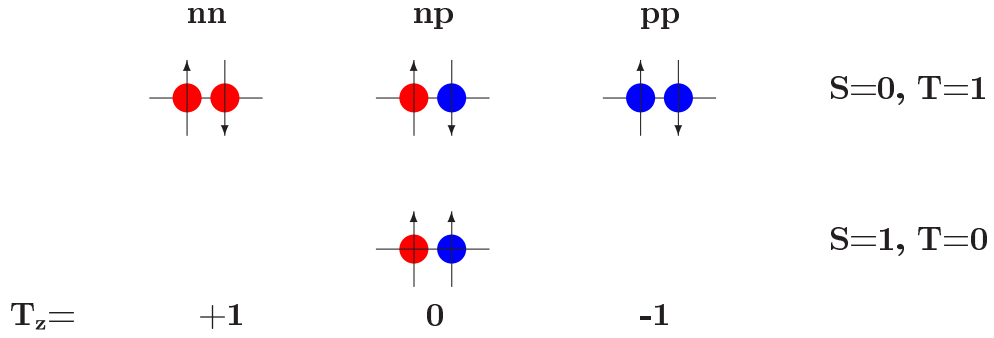


FIG. 3.3 – Illustration de différents couplages entre deux nucléons. Les cercles blancs représentent les protons et les cercles noirs représentent les neutrons, et les flèches décrivent les spins.

À partir de cette idée de base, nous allons utiliser HTDA pour traiter les corrélations d'appariement et vibrationnelles dans le fondamental et les états excités. À partir d'un état de vide de HF on construit une base à N particules qui est le résultat des excitations de type $|(n\nu\nu h)_\nu(m\nu\nu p)_\pi\rangle$. On ne doit évidemment pas négliger les corrélations entre neutrons et protons. Pour cela, nous avons développé un code qui tient compte des corrélations entre neutrons ($\nu - \nu$), protons ($\pi - \pi$), et neutrons et protons ($\nu - \pi$) et ceci quelque soit le type de corrélations : appariement en utilisant l'interaction delta (δ), ou vibrationnelle en utilisant l'interaction quadrupole-quadrupole (QQ).

3.7 Le couplage neutron-proton et l'isospin

D'après le principe de Pauli, toute fonction d'onde d'un état de N fermions identiques est antisymétrique par rapport à toute permutation de ces N particules. Le résultat de l'action de tous opérateur de permutation \hat{P} sur un état de N particules revient donc à multiplier cet état par une phase égale à la signature de cette permutation.

Dans le cas particulier d'un état de deux nucléons identiques ($n - n, p - p$) ou non identiques ($n - p$), la fonction d'onde totale doit être antisymétrique, après l'échange de l'ensemble des variables (espace, spin et isospin) des deux particules.

Pour une fonction d'onde spatiale symétrique, les deux cas possibles pour assurer l'antisymétrisation de la fonction d'onde totale pour des états de bon spin (S) et isospin (T) (dans la mesure où ils sont dans deux états propres de s_z) sont schématisés dans la figure 3.3.

D'après le principe de Pauli, deux particules identiques ($n - n, p - p$) ne peuvent occuper le même état sauf s'ils ont un spin opposé, donc spin total $S=0$ et $T=1$. Dans le cas de deux particules non identiques ($n - p$), ils peuvent être couplées par deux spins parallèles ($S=1, T=0$) ou antiparallèles ($S=0, T=1$), où dans les deux cas $T_z = 0$.

Comme il a été mentionné dans la section 2.1.1, dans les noyaux pairs-pairs, les corrélations d'appariement entre les nucléons de même nature ($S=0, T=1$) sont fortes et leurs

3.8 L'interaction quadrupole-quadrupole

effets se manifestent dans la spectroscopie de la plupart des noyaux. Compte tenu du fait que pour les noyaux lourds dans la vallée de stabilité les fonctions d'onde individuelles de neutrons et protons proches de la surface de Fermi, ont une structure spatiale différente, la plupart des travaux se sont focalisés sur l'appariement de particules identiques, donc le canal d'isospin $T=1$ (avec $|T_z|=1$). Par contre, l'appariement $T=0$ se manifeste dans les propriétés des noyaux situés sur la ligne $N=Z$ et son voisinage immédiat (voir pour plus de détail la référence [85]).

D'après les résultats obtenus en [35], l'inclusion de la composante $T=0$ de l'appariement isoscalaire conduit à un surplus de stabilité supplémentaire dans les noyaux $N=Z$.

3.8 L'interaction quadrupole-quadrupole

Pour le traitement d'une partie des corrélations vibrationnelles, nous nous sommes limités à considérer une interaction de basse multipolarité (*cf.* section 2.2.2), en fait de type quadrupole-quadrupole QQ , définie comme suit

$$\hat{V}_{\text{res}} = \frac{1}{2} V_2^{QQ} \sum_{ij} \hat{Q}(i) \hat{Q}^*(j), \quad (3.13)$$

où \hat{Q} est l'opérateur quadrupolaire ($l=2$) défini dans les deux cas isocalaire et isovecteur par

$$Q_{Tl\mu} = \begin{cases} \sum_i r_i^l Y_{l\mu}(\theta_i) & \Delta T = 0 \\ \sum_i \tau_{zi} r_i^l Y_{l\mu}(\theta_i) & \Delta T = 1 \end{cases}$$

En général, l'interaction résiduelle (3.13) est fortement répulsive dans la canal $\Delta T = 1$ [1], et attractive pour $\Delta T = 0$.

La constante de couplage V_l a été estimée par les auteurs des références [86, 87, 37], de telle sorte qu'elle soit pour un opérateur multipolaire d'ordre l ,

$$V_l = \frac{4\pi}{(2l+1)} \frac{M\omega^2}{A < r^{2l-2} >}.$$

Sachant que les paramètres de l'intensité varient en fonction du nombre de masse, comme $r^2 \propto A^{2/3}$ et $M\omega^2 \propto A^{-2/3}$, la constante de l'interaction QQ varierait suivant ce modèle simpliste (*cf.* aussi [40, 43]) d'une région de la charte des noyaux à une autre, de telle sorte que

$$V_2^{QQ} \propto A^{-\frac{7}{3}} \text{MeV.fm}^{-4}$$

Dans notre étude, on s'intéresse au cas isoscalaire dans lequel la force s'écrit sous la forme suivante [43],

$$\hat{V}_{\text{res}} = \frac{1}{2} V_2^{QQ} \sum_{ij} \left[\hat{Q}_\nu(i) \hat{Q}_\nu^*(j) + \hat{Q}_\pi(i) \hat{Q}_\pi^*(j) + [\hat{Q}_\nu(i) \hat{Q}_\pi^*(j) + \hat{Q}_\pi(i) \hat{Q}_\nu^*(j)] \right]. \quad (3.14)$$

En explicitant de la force quadrupolaire agissant entre neutron-neutron, proton-proton et neutron-proton. Cette dernière force joue un rôle essentiel dans le traitement des corrélations vibrationnelles, comme on va le voir dans le chapitre 4.

Puisque l'interaction QQ est séparable, le calcul des éléments de la matrice d'interaction entre les états à N particules conduit aux calculs de cette interaction entre les états de HF (a, b, c, d) , qui se décomposent sur la B.O.H.S.A (i, j, k, l) , de telle sorte que

$$\begin{aligned} \langle ab|\hat{Q}\hat{Q}^*|\widetilde{cd}\rangle &= \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \left[\langle a|Q^{\mu}|c\rangle \langle b|Q^{-\mu}|d\rangle - \langle a|Q^{\mu}|d\rangle \langle b|Q^{-\mu}|c\rangle \right] \\ &= \sum_{\mu} \sum_{ijkl} (-1)^{\mu} \langle i|Q^{\mu}|j\rangle \langle k|Q^{-\mu}|l\rangle \left[C_i^a C_j^c C_k^b C_l^d - C_i^a C_j^d C_k^b C_l^c \right]. \end{aligned}$$

où C_i^a sont les coefficients du développement des états HF sur les états de la B.O.H.S.A.

On doit tenir compte dans le calcul des éléments de matrice du moment quadrupolaire des conditions de symétries

$$\begin{aligned} \pi_a \pi_b &= \pi_c \pi_d \\ k_a + k_b &= k_c + k_d. \end{aligned}$$

Les éléments de matrice de l'opérateur quadrupolaire isosocalaire entre les états de B.O.H.S.A sont calculés dans l'annexe E.3, pour différentes valeurs de $\mu = 0, \pm 1, \pm 2$.

3.9 La construction de la base $|(n\text{pnh})_{\nu}(m\text{pmh})_{\pi}\rangle$

Tenir compte des corrélations neutron-proton nécessite la construction d'une base à N particules de type $|(n\text{pnh})_{\nu}(m\text{pmh})_{\pi}\rangle$ (cf. figure 3.4). Elle contient l'ensemble des couplages entre les deux bases neutrons $|(n\text{pnh})_{\nu}\rangle$ et protons $|(m\text{pmh})_{\pi}\rangle$ qui sont résultats d'excitation particule-trou sur le quasi-vide

$$|\Phi_{00}\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} \hat{a}_{\nu_i}^{\dagger} \hat{a}_{\nu_i}^{\dagger} \prod_{j=1}^{Z/2} \hat{a}_{\pi_j}^{\dagger} \hat{a}_{\pi_j}^{\dagger} |0\rangle$$

tel que

$$|\Phi_{nm}\rangle = \prod_{i=1}^n \hat{a}_{\nu_i}^{\dagger} \prod_{j=1}^n \hat{a}_{\nu_j} \prod_{k=1}^m \hat{a}_{\pi_k}^{\dagger} \prod_{l=1}^m \hat{a}_{\pi_l} |\Phi_{00}\rangle$$

où n et m sont l'ordre d'excitation particule-trou pour les neutrons et les protons respectivement. Dans notre étude nous nous sommes limités à $n, m \leq 2$.

La composante du moment angulaire k le long de l'axe de symétrie $(0z)$, et la parité π sont des bons nombres quantique, à cause des symétries imposées (rotation axiale et réflexion droite-gauche) dans notre cas.

Pour un état K^{Π} donné (ici noyau pair-pair donc $K^{\Pi} = 0^{+}$), la construction de la base se fait à partir de la configuration $|(0\text{p}0\text{h})_{\nu}(0\text{p}0\text{h})_{\pi}\rangle$ qui est le vide, duquel, nous construisons la base des états $|(n\text{pnh})_{\nu}(m\text{pmh})_{\pi}\rangle$, résultat d'excitations particule-trou $(p-t)$ satisfaisant à

$$\begin{aligned} K &= \sum_{i=1}^n (k_{p_i}^{\nu} - k_{t_i}^{\nu}) + \sum_{i=1}^m (k_{p_i}^{\pi} - k_{t_i}^{\pi}) \\ \Pi &= \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \prod_{\tau=\nu,\pi} \pi_{p_i}^{\tau} \pi_{t_i}^{\tau} \pi_{p_j}^{\tau} \pi_{t_j}^{\tau}. \end{aligned}$$

3.10 Les éléments de la matrice du Hamiltonien

Parmi ces excitations, nous avons donc :

- la configuration $|(1p1h)_\nu(0p0h)_\pi\rangle$ qui contient des excitations d'un état n (état k de trou neutron) ou d'un état \bar{n} (état $-k$ de trou neutron) avec

$$\begin{aligned} K &= k_p^\nu - k_t^\nu \\ \Pi &= \pi_p^\nu \cdot \pi_t^\nu \end{aligned}$$

- la configuration $|(0p0h)_\nu(1p1h)_\pi\rangle$ qui contient des excitations d'un état p (état k de trou proton) ou d'un état \bar{p} (état $-k$ de trou proton) avec

$$\begin{aligned} K &= k_p^\pi - k_t^\pi \\ \Pi &= \pi_p^\pi \cdot \pi_t^\pi \end{aligned}$$

- La configuration $|(1p1h)_\nu(1p1h)_\pi\rangle$ qui est le couplage entre deux configurations $|1p1h)_\nu$ et $|1p1h)_\pi$. Elle contient les excitations de type : $np, n\bar{p}, \bar{n}p, \bar{n}\bar{p}$, de telle sorte

$$\begin{aligned} K &= (k_p^\nu + k_p^\pi) - (k_t^\nu + k_t^\pi) \\ \Pi &= \pi_p^\nu \cdot \pi_p^\pi \cdot \pi_t^\nu \cdot \pi_t^\pi. \end{aligned}$$

où les transferts d'une paire neutron-proton sont un cas particulier.

- La configuration $|(2p2h)_\nu(0p0h)_\pi\rangle$, où on se limitera ici aux transferts d'une paire neutron $n\bar{n}$, ce qui correspond à des excitations 0^+ . Et similairement pour la configuration $|(0p0h)_\nu(2p2h)_\pi\rangle$.
- La configuration $|(2p2h)_\nu(2p2h)_\pi\rangle$, où on se limitera aux transferts de deux paires de même type neutron-neutron et proton-proton $n\bar{n}p\bar{p}$.
- ...

Dans le traitement des corrélations vibrationnelles à partir d'HTDA, on s'est limité à des excitations d'ordre $(n, m \leq 1)$ pour les neutrons ou les protons. Dans le cas où l'on traite simultanément les corrélations vibrationnelles et appariement, nous avons ajouté à ces excitations des cas particuliers d'excitations d'ordre supérieur $(n, m = 2)$.

3.10 Les éléments de la matrice du Hamiltonien

Les éléments de la matrice du Hamiltonien \hat{H} (2.14) entre les états de la base à N particules $|(npnh)_\nu(mpmh)_\pi\rangle$, sont tels que

$$\langle \Phi_i^{(\nu\pi)} | \hat{H} | \Phi_j^{(\nu\pi)} \rangle = (\langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + E_{p-h}^{i\nu} + E_{p-h}^{i\pi}) \delta_{ij} + \langle \Phi_i^{(\nu\pi)} | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j^{(\nu\pi)} \rangle, \quad (3.15)$$

où $E_{p-h}^{i\nu}, E_{p-h}^{i\pi}$ sont respectivement les énergies d'excitations de neutrons et protons de l'état $|\Phi_i\rangle$, par rapport à $|\Phi_0\rangle$.

On constate avec l'équation (3.15), que le calcul des éléments de \hat{H} implique le calcul des éléments de V_{res} entre les états à N particules $|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle$. Dans ce qui suit nous allons résumer (voir le calcul détaillé dans l'annexe (D.2)) le résultat final du calcul de ces éléments, en séparant le cas diagonal et le cas non diagonal.

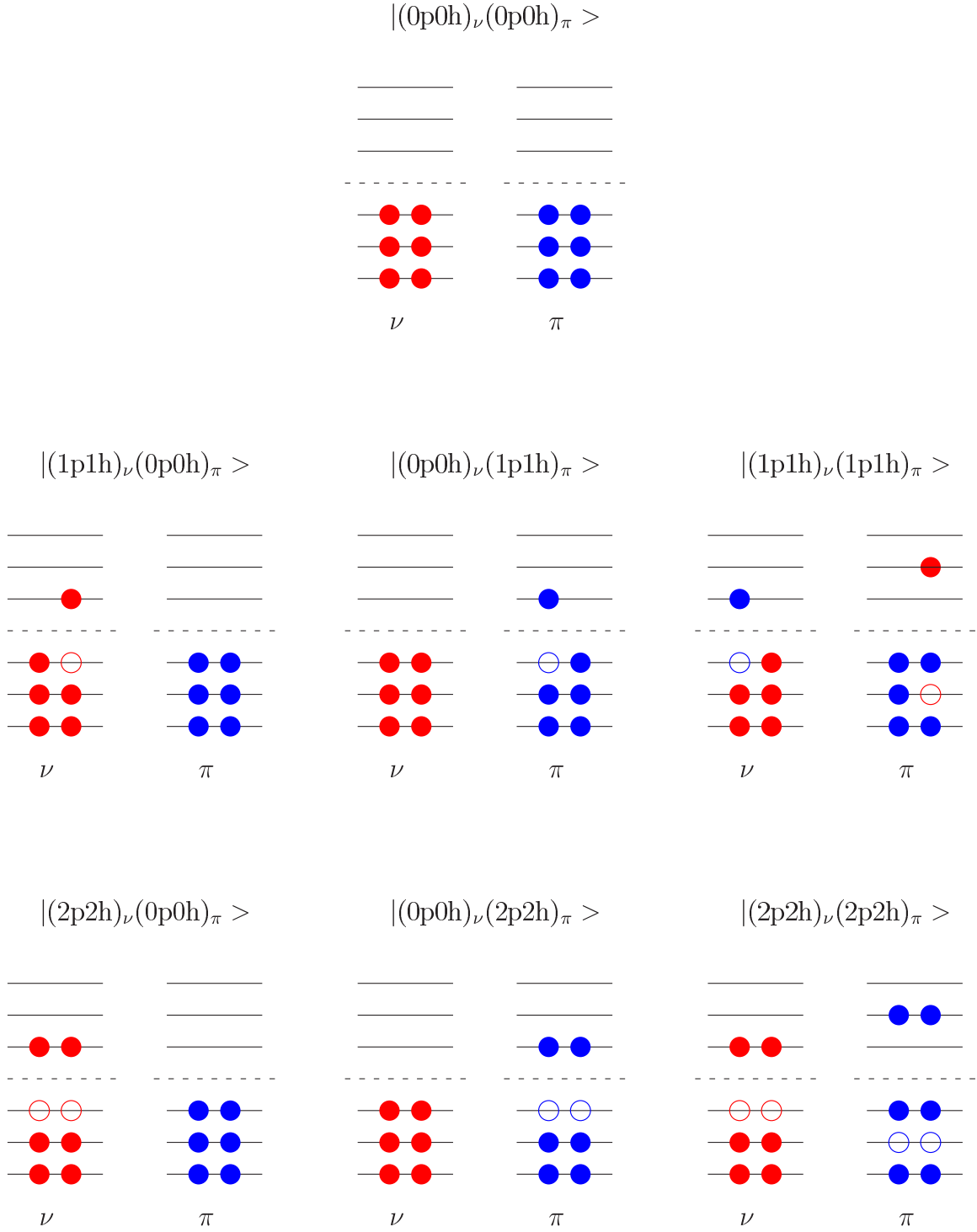


FIG. 3.4 – Les différentes excitations particule-trou tenues compte dans le traitement des corrélations vibrationnelles et appariement.

3.10.1 Les éléments diagonaux

$$|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle = |\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle$$

$$\langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{H}|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + E_{p-h}^{i\nu} + E_{p-h}^{i\pi} + \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{V}_{\text{res}}|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle$$

et d'après l'équation (D.14) on obtient

$$\begin{aligned} \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{H}|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle &= \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + E_{p-h}^{i\nu} + E_{p-h}^{i\pi} \\ &+ \sum_{\tau=\nu,\pi} \left[\sum_{k<l}^{p_\tau} + \sum_{k<l}^{t_\tau} - \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_\tau} \right] \langle kl|\hat{v}|\widetilde{kl}\rangle \\ &+ \sum_{\tau<\tau'=\nu,\pi} \left[\sum_k^{p_\tau} \sum_l^{p_{\tau'}} - \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_{\tau'}} - \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{p_{\tau'}} + \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{t_{\tau'}} \right] \langle kl|\hat{v}|kl\rangle. \end{aligned} \quad (3.16)$$

3.10.2 Les éléments non diagonaux

De la même façon que ce nous avons utilisé dans le chapitre 2, on considère les cas suivants :

Les états $|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle$ et $|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle$ différent par un nucléon

Dans ce cas, et à une phase près $|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle$
Par hypothèse pour une particule d'isospin $\tau_\alpha = \tau_a$ mais $\tau \neq \tau'_k$ et d'après l'équation (D.15), nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{H}|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle &= \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{V}_{\text{res}}|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle \\ &= \left[\sum_k^{p_\tau} - \sum_k^{t_\tau} \right] \langle ka|\hat{v}|\widetilde{k\alpha}\rangle + \left[\sum_k^{p_{\tau'}} - \sum_k^{t_{\tau'}} \right] \langle ka|\hat{v}|k\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Les états $|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle$ et $|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle$ différent par deux particules

Dans ce cas $|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b |\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle$

• Par hypothèse dans le cas de deux particules non identiques $\tau_\alpha = \tau_a$ mais $\tau_\alpha \neq \tau_\beta$, et d'après l'équation (D.16) nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{H}|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle &= \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{V}_{\text{res}}|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle \\ &= \langle ab|\hat{v}|\beta\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

• Nous obtenons dans le cas de deux particules identiques $\tau_\alpha = \tau_a = \tau_\beta = \tau_b$,

$$\begin{aligned} \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{H}|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle &= \langle\Phi_i^{(\nu\pi)}|\hat{V}_{\text{res}}|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle \\ &= \langle ab|\hat{v}|\widetilde{\beta\alpha}\rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Les états $|\Phi_i^{(\nu\pi)}\rangle$ et $|\Phi_j^{(\nu\pi)}\rangle$ diffèrent par plus deux particules

Dans ce cas

$$\langle \Phi_i^{(\nu\pi)} | \hat{H} | \Phi_j^{(\nu\pi)} \rangle = \langle \Phi_i^{(\nu\pi)} | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j^{(\nu\pi)} \rangle = 0 \quad (3.20)$$

3.11 Diagonalisation

La matrice d'Hamiltonien \hat{H} , est une matrice symétrique. Le fait de tenir compte d'une part des corrélations entre les particules identiques et non identiques, et d'autre part des corrélations vibrationnelles dans une grande fenêtre d'excitations particule-trou, a rendu la taille de la matrice très grande voir impossible à diagonaliser avec le code [51, 52] utilisé auparavant dans HTDA. C'est pour cela, que nous avons utilisé un code de diagonalisation développé par E. Caurier (IReS Strasbourg) dans le cadre du modèle en couches permettant d'obtenir aisément non seulement la diagonalisation des grandes matrices de taille $\leq 10^9$, mais aussi le nombre désiré d'états excités.

L'algorithme de LANCZOS est utilisée dans les calculs du modèle en couches [88] pour diagonaliser les grandes matrices. La méthode revient à construire une base orthogonale d'état à N particules, où la matrice du Hamiltonien \hat{H} est tridiagonale. Cette base est obtenue en appliquant de façon itérative l'opérateur \hat{H} , sur un vecteur initial normalisé φ_1 , dénommé pivot, pour obtenir les composantes parallèle et orthogonale au vecteur initial φ_1 :

$$\hat{H}|\varphi_1\rangle = E_{11}|\varphi_1\rangle + E_{12}|\varphi_2\rangle.$$

où $E_{11} = \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_1 \rangle$.

En appliquant de nouveau \hat{H} sur φ_2 , on obtient un troisième vecteur φ_3 orthogonal aux deux premiers φ_1 et φ_2 .

$$\hat{H}|\varphi_2\rangle = E_{21}|\varphi_1\rangle + E_{22}|\varphi_2\rangle + E_{23}|\varphi_3\rangle.$$

(la symétrie de \hat{H} implique $E_{21} = E_{12}$).

Le processus continue pour n itérations (n est noté par Nloop dans le chapitre 4), où on obtient l'énergie diagonale E_{nn} , un nouveau vecteur $|\varphi_{n+1}\rangle$ et l'énergie non diagonale $E_{n,n+1}$.

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_{n,n-1}|\varphi_{n-1}\rangle + E_{nn}|\varphi_n\rangle + E_{n,n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

$$E_{n,n-1} = E_{n-1,n}, \quad E_{nn} = \langle \varphi_n | \hat{H} | \varphi_n \rangle,$$

$$E_{n,n+1}|\varphi_{n+1}\rangle = \hat{H}|\varphi_n\rangle - E_{nn}|\varphi_n\rangle - E_{n,n-1}|\varphi_{n-1}\rangle.$$

Le processus itératif continue jusqu'à la convergence de toutes les valeurs propres. Finalement on devra construire une matrice tridiagonale, tel que

$$\langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle = 0 \quad \text{si} \quad |i - j| > 1.$$

Les valeurs E et les vecteurs propres x de la matrice tridiagonale nommée G associée à \hat{H} , qui sont le résultat de la diagonalisation, nous permettent de déduire les valeurs propres

3.12 Les moments dans le cadre de l'approche HTDA

et les vecteurs propres de \hat{H} , à partir de la matrice unitaire $U = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots)$, où les vecteurs colonnes sont les vecteurs φ_i , tel que

$$\begin{aligned} G &= U^t H U \\ Gx &= U^t H (Ux) \\ Ex &= U^t H (Ux) \\ E(Ux) &= H(Ux) \end{aligned}$$

Il est clair, que les valeurs propres de \hat{H} sont égales aux valeurs propres de G pour les vecteurs propres Ux , où x sont les vecteurs propres de G .

Physiquement, le résultat de la diagonalisation nous donne l'état corrélé le plus bas en énergie ($n = 0$), et les états excités ($n > 0$) qui se décomposent sur les états à N particules comme,

$$\begin{aligned} |\Psi_n\rangle &= \chi_{00}^{(n)} |\Phi_{00}^{\nu\pi}\rangle + \\ &\sum_{(1p1h)_\nu} \chi_{10}^{(n)} |\Phi_{10}^{\nu\pi}\rangle + \sum_{(1p1h)_\pi} \chi_{01}^{(n)} |\Phi_{01}^{\nu\pi}\rangle + \sum_{(1p1h)_\nu} \sum_{(1p1h)_\pi} \chi_{11}^{(n)} |\Phi_{11}^{\nu\pi}\rangle + \\ &\sum_{(2p2h)_\nu} \chi_{20}^{(n)} |\Phi_{20}^{\nu\pi}\rangle + \sum_{(2p2h)_\pi} \chi_{02}^{(n)} |\Phi_{02}^{\nu\pi}\rangle + \sum_{(2p2h)_\nu} \sum_{(2p2h)_\pi} \chi_{22}^{(n)} |\Phi_{22}^{\nu\pi}\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

avec $\sum_{ij} \chi_{ij}^2 = 1$, pour un état $|\Psi_n\rangle$ donné.

3.12 Les moments dans le cadre de l'approche HTDA

Les règles de somme permettent de donner un lien entre les moments définis par l'équation (3.2) et certaines quantités (telle que des valeurs moyennes des opérateurs) liées à l'état fondamental (voir section 4.4). Pour cela l'évaluation de ces moments est un instrument précieux dans la théorie des excitations collectives.

Soit un ensemble d'états, l'état fondamental $|\Psi_0\rangle$ et les états excités $|\Psi_n\rangle$ qui forment une base complète orthonormée, avec les énergies E_0 et E_n correspondantes. Dans ce cas le moment d'ordre k s'écrit en fonction de l'amplitude de transition d'un opérateur à un corps $\hat{\Theta}$ comme

$$m_k = \sum_n (E_n - E_0)^k |\langle \Psi_n | \hat{\Theta} | \Psi_0 \rangle|^2. \quad (3.22)$$

Les éléments de matrice de l'opérateur à un corps $\hat{\Theta}$ entre l'état fondamental et les états excités définis dans l'équation (3.22) sont tels que

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{\Theta} | \Psi_n \rangle &= \sum_{i,j} \langle i | \hat{\Theta} | j \rangle \langle \Psi_0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Psi_n \rangle \\ &= \sum_{i,j} \theta_{ij} \tilde{\rho}_{ji} = \text{Tr}(\theta \tilde{\rho}). \end{aligned}$$

avec $\tilde{\rho}$ est la pseudo matrice densité, qui diffère de la matrice densité réduite, car elle est définie entre deux états différents par

$$\begin{aligned}
 \tilde{\rho}_{ij} &= \langle \Psi_0 | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Psi_n \rangle \\
 &= \sum_{kk'} \chi_k \chi'_{k'} \langle \Phi_k | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Phi_{k'} \rangle \\
 &= \sum_k \chi_k \chi'_k \langle \Phi_k | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Phi_k \rangle + \sum_{k < k'} \chi_k \chi'_{k'} \langle \Phi_k | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Phi_{k'} \rangle + \sum_{k > k'} \chi_k \chi'_{k'} \langle \Phi_k | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Phi_{k'} \rangle \\
 &= \sum_k \chi_k \chi'_k \delta_{ij}^{T(\Phi_k)} + \sum_{k < k'} \langle \Phi_k | \chi_k \chi'_{k'} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \chi_{k'} \chi'_k \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Phi_{k'} \rangle.
 \end{aligned}$$

En tenant compte de la condition d'orthogonalité entre les états Ψ et Ψ' qui implique que $\sum_k \chi_k \chi'_k = 0$, on obtient donc

$$\tilde{\rho}_{ij} = \sum_k \chi_k \chi'_k (\delta_{ij}^p - \delta_{ij}^t) + \sum_{k < k'} \langle \Phi_k | \chi_k \chi'_{k'} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \chi_{k'} \chi'_k \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Phi_{k'} \rangle.$$

Chapitre 4

APPLICATIONS ET RÉSULTATS

Dans le cadre du champ moyen non relativiste, différentes versions de la RPA et quasi-particule RPA (QRPA) basées sur les interactions phénoménologiques de type Skyrme [89, 54] ou de Gogny [61], ont été utilisées pour la description des excitations collectives et les résonances géantes des noyaux stables ou loin de la vallée de stabilité. Les observables caractéristiques des résonances : énergie, largeur, ...etc fournissent des informations sur les propriétés générales des noyaux, comme par exemple le coefficient de compressibilité [59, 90] ou la masse effective [82]. Nous allons préparer ici une version HTDA de ce type d'études.

Ce chapitre est en fait consacré à une étude préliminaire des corrélations vibrationnelles de type quadrupole, d'abord sans et ensuite en tenant compte des corrélations d'appariement, dans le cadre HTDA, donc avec **conservation du nombre de particules** et sans violation du principe de Pauli. Nous allons décrire différents aspects des résonances géantes quadrupolaires isocalaires (RGQIS) pour le noyau ^{40}Ca . Nous le ferons en utilisant un code que nous avons développé pour traiter les différents types de corrélations (vibrationnelles et d'appariement), et en tenant compte de l'interaction entre différents états de charge des nucléons. Nous nous sommes intéressés aux énergies, largeurs et la masse effective des RGQIS qui ont été comparées avec l'expérience et le résultat d'autres théories. L'effet des corrélations d'appariement dans les deux canaux $S=0, T=1$ et $S=1, T=0$ a été également traité, en présence des corrélations vibrationnelles.

4.1 Aspects numériques

L'étude des corrélations vibrationnelles dans les noyaux nécessite de tenir compte de l'interaction entre les neutrons et les protons. Pour cela, nous avons développé un code permettant de traiter une partie des corrélations vibrationnelles, plus précisément celles de type quadrupole-quadrupole dans le cadre de l'approche HTDA, en tenant compte de tous types d'interactions (neutron-neutron, proton-proton et neutron-proton).

D'un point de vue numérique, nous avons considéré deux fenêtres d'excitation : une grande fenêtre de taille $\pm X_{QQ}$ autour du niveau de Fermi (avec une valeur de X_{QQ} comprise typiquement entre 20 et 50 MeV) pour traiter les corrélations de type quadrupole-

quadrupole, et une petite fenêtre de taille $\pm X_p$ autour du niveau de Fermi (avec une valeur de X_p comprise typiquement entre 6 et 12 MeV) pour traiter les corrélations d'appariement.

Dans la grande fenêtre nous avons considéré les excitations de type $((1p1h)_\nu(0p0h)_\pi, (0p0h)_\nu(1p1h)_\pi, (1p1h)_\nu(1p1h)_\pi)$, et dans la petite fenêtre nous avons ajouté les transferts de paires $((2p2h)_\nu(0p0h)_\pi, (0p0h)_\nu(2p2h)_\pi, (2p2h)_\nu(2p2h)_\pi)$. Notons que nous nous limitons à ces excitations à ce stade préliminaire et pour des raisons pratiques évidentes, nous négligeons le couplage explicite entre transferts de paires et excitations 1p-1h par exemple.

On va s'intéresser ici à un noyau sphérique doublement magique, le ^{40}Ca . Les calculs numériques sont effectués pour traiter les deux cas suivants : corrélations vibrationnelles avec et sans appariement. Pour la partie HF nous avons utilisé deux forces de Skyrme (SIII et SkM*) et une troncation $N=6$ de la B.O.H.S.A pour les états à une particule. Dans la partie d'interaction résiduelle, on s'est limité dans un premier temps aux corrélations de type quadrupole-quadrupole (3.13). Nous avons ajouté ensuite à cette dernière une interaction delta, pour traiter en même temps les corrélations vibrationnelles et d'appariement.

4.2 Traitement des corrélations vibrationnelles dans le cas du ^{40}Ca

Tout d'abord, nous nous sommes intéressés aux corrélations vibrationnelles de faible amplitude traitées dans le cadre HTDA. À partir d'un calcul HF pur (sans BCS) auto cohérent avec les deux interactions SIII et SkM*, nous construisons dans chacun des cas une base à N particules résultat des excitations de type $|(nph)_\nu(mph)_\pi\rangle$ avec $n_{\max}=m_{\max}=1$ dans la grande fenêtre seulement ($X_p = 0$). Un exemple du nombre total des états pour chaque type de configuration est présenté dans la table 4.1. Le calcul des éléments de matrice d'interaction (QQ) entre les états pairs par renversement du temps et la diagonalisation de la matrice ainsi formée, nous donnent les états corrélés : l'état fondamental (E_0, Ψ_0) et les états excités (E_n, Ψ_n) . À partir de ces résultats, nous avons calculé les moments m_k d'ordres k (3.2) pour $k = -1, 0, 1, 3,$, les énergies E_k (3.6) correspondantes et la largeur Γ (3.12) de la RGQIS du ^{40}Ca , pour les deux interactions SIII et SkM*.

La contribution $\mu_1(n)$ au moment m_1 d'un état excité $|n\rangle$ est définie par

$$m_1 = \sum_n \mu_1(n),$$

où $\mu_1(n)$ est la fonction d'excitation de l'état fondamental $|0\rangle$ à un état excité $|n\rangle$,

$$\mu_1(n) = |\langle n|\hat{Q}|0\rangle|^2(E_n - E_0).$$

Pour la visualiser plus aisément, on la convolue avec un facteur de forme gaussien d'une largeur σ , de telle sorte que

$$\mu_1(E) = \sum_n \mu_1(n) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(E - E_n)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.1)$$

(nm)	(10)	(01)	(11)
ntot	194	194	149048

TAB. 4.1 – Nombre total des états d'excitation de type $(nm)=(10),(01)$ et (11) dans le noyau ^{40}Ca pour une fenêtre de taille $X_{QQ} = \pm 40 \text{ MeV}$

où la sommation porte sur les états excités n , avec

$$m_1 = \int_0^\infty \mu_1(E) dE$$

(où E est l'énergie d'excitation).

Dans ce qui suit, on va fixer plusieurs paramètres numériques et physiques en vue de produire une représentation satisfaisante de la RGQIS.

4.2.1 L'intensité de l'interaction quadrupole-quadrupole

Comme il a été suggéré dans la référence [40] et comme nous l'avons expliqué dans la section 3.8, l'intensité V_2^{QQ} de l'interaction QQ varie globalement en fonction du nombre de masse A comme

$$V_2^{QQ} = \alpha A^{-7/3} \text{MeV} \cdot \text{fm}^{-4}.$$

Pour fixer le paramètre de la loi d'échelle α , on a étudié l'effet de sa variation sur le fondamental et les états excités. Quelques résultats de ces études concernant l'état fondamental sont présentés sur les figures 4.1 et 4.2.

La figure 4.1 représente la variation en fonction de V_2^{QQ} de l'énergie de corrélation du fondamental définie par la différence de la valeur moyenne du Hamiltonien entre l'état corrélé et l'état du vide (*cf.* équation (2.23)). Comme on peut le voir, augmenter l'intensité de la force QQ conduit à augmenter non seulement l'énergie du fondamental dans les deux cas SIII et SkM*, mais aussi l'écart entre les énergies de corrélations du fondamental entre les résultats obtenus avec les deux paramétrisations de l'interaction de Skyrme (SIII et SkM*).

Sur la figure 4.2 on a représenté la probabilité d'occupation de différentes configurations de type $|(n\text{pnh})_\nu(m\text{pmh})_\pi\rangle$ notées ici et dans ce qui suit par $(nm) = (00), (10), (01), (11)$ en fonction de l'intensité de la force QQ (voir aussi la table 4.2). Plus cette dernière augmente et plus la probabilité du fondamental (ici (00)) diminue contrairement à la probabilité des états d'excitations collectives de type (11), qui croient progressivement pour atteindre une valeur $\sim 20\%$ pour une intensité $-80A^{-7/3} \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$, alors que les excitations de type (10) et (01) restent toujours extrêmement faibles (*cf.* table 4.2).

Cette variation peut s'expliquer par le fait qu'augmenter l'intensité d'une interaction résiduelle (ici quadrupolaire) induit plus de corrélations dans le fondamental. Ainsi, l'énergie de corrélation augmente (voir figure 4.1) et la probabilité χ_{00}^2 diminue.

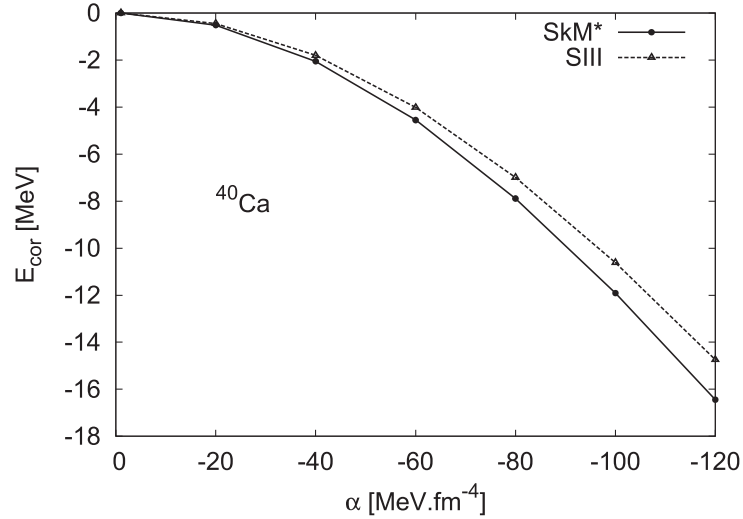


FIG. 4.1 – Variation de l'énergie de corrélation de l'état fondamental en fonction du paramètre α de l'intensité de la force QQ , pour les paramétrisations SIII et SkM*.

Généralement, les états d'excitations collectives simultanées de neutrons et protons, de type $|(1p1h)_\nu(1p1h)_\pi\rangle$, jouent un rôle bien plus important dans le traitement des corrélations vibrationnelles, que les excitations individuelles neutrons ($|(1p1h)_\nu(0p0h)_\pi\rangle$) ou protons ($|(0p0h)_\nu(1p1h)_\pi\rangle$). Ceci est dû d'un côté au nombre important des états correspondant à ce type d'excitations (*cf.* table 4.1).

Ce résultat confirme la nécessité de prendre en compte dans la base à N particules, ces excitations simultanées de neutrons et de protons, et bien entendu le rôle majeur de l'interaction neutron-proton dans le traitement des corrélations vibrationnelles.

Pour fixer l'intensité de l'interaction QQ , à utiliser dans nos calculs, on a étudié son effet sur les états excités. La figure 4.3 montre la contribution au moment d'ordre $k = 1$ des divers états excités, pour différentes valeurs α intervenant dans l'intensité V_2^{QQ} de l'interaction QQ . Il apparaît clairement, qu'en augmentant cette dernière, les pics sont moins fragmentés, et contribuent de plus en plus à un seul pic bien prononcé à partir d'une valeur de $|\alpha| = 80 \text{ MeV.fm}^{-4}$. Ce résultat reste stable en augmentant l'intensité au delà de cette valeur. C'est pour cela que nous allons prendre dans ce qui suit $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ comme valeur de l'intensité d'interaction QQ dans les configurations $\nu - \nu$, $\pi - \pi$ et $\nu - \pi$. On note que cette dernière est du même ordre de grandeur que celle retenue par *Kisslinger et al.* [40], où dans le cas du ^{40}Ca le nombre du quanta $n = 2$.

4.2.2 La taille de la grande fenêtre X_{QQ}

Une des étapes numériques les plus importantes de notre travail a été d'étudier l'effet de la troncation des états à une particule (voir section 3.4) sur les moments. Pour cela, nous avons fait varier l'espace des états à une particule de ± 15 à $\pm 50 \text{ MeV}$ autour du niveau de Fermi, en nous limitant aux excitations de type (1p1h). Les résultats obtenus

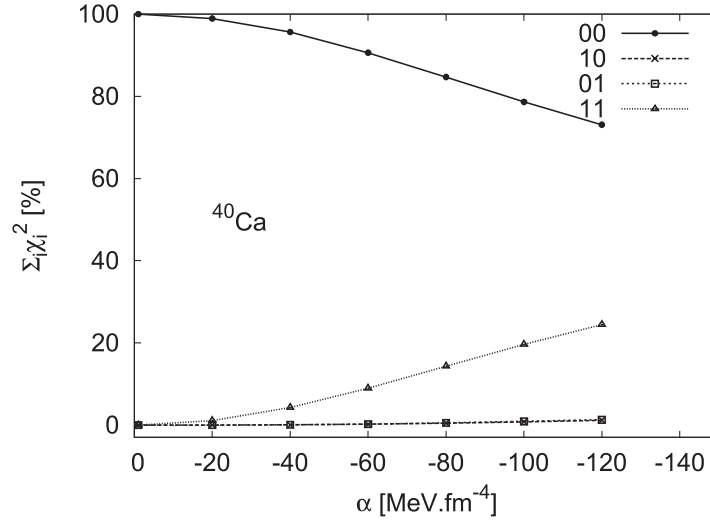


FIG. 4.2 – Probabilités d’occupation de différentes configurations $|(nph)_\nu(mph)_\pi\rangle$ notées $nm = (00, 10, 01, 11)$ calculées le cas de l’interaction SkM^* , en fonction du paramètre α de l’intensité de la force QQ .

α	(00)	(10)	(01)	(11)
-1.	99.997	0.000	0.000	0.003
-20.	98.893	0.004	0.004	1.098
-40.	95.621	0.051	0.058	4.268
-60.	90.610	0.204	0.231	8.953
-80.	84.670	0.475	0.532	14.321
-100.	78.638	0.818	0.909	19.633
-120.	73.067	1.178	1.299	24.454

TAB. 4.2 – Variations de la probabilité d’occupation (%) de différentes configurations (nm) en fonction du paramètre d’intensité quadrupolaire α .

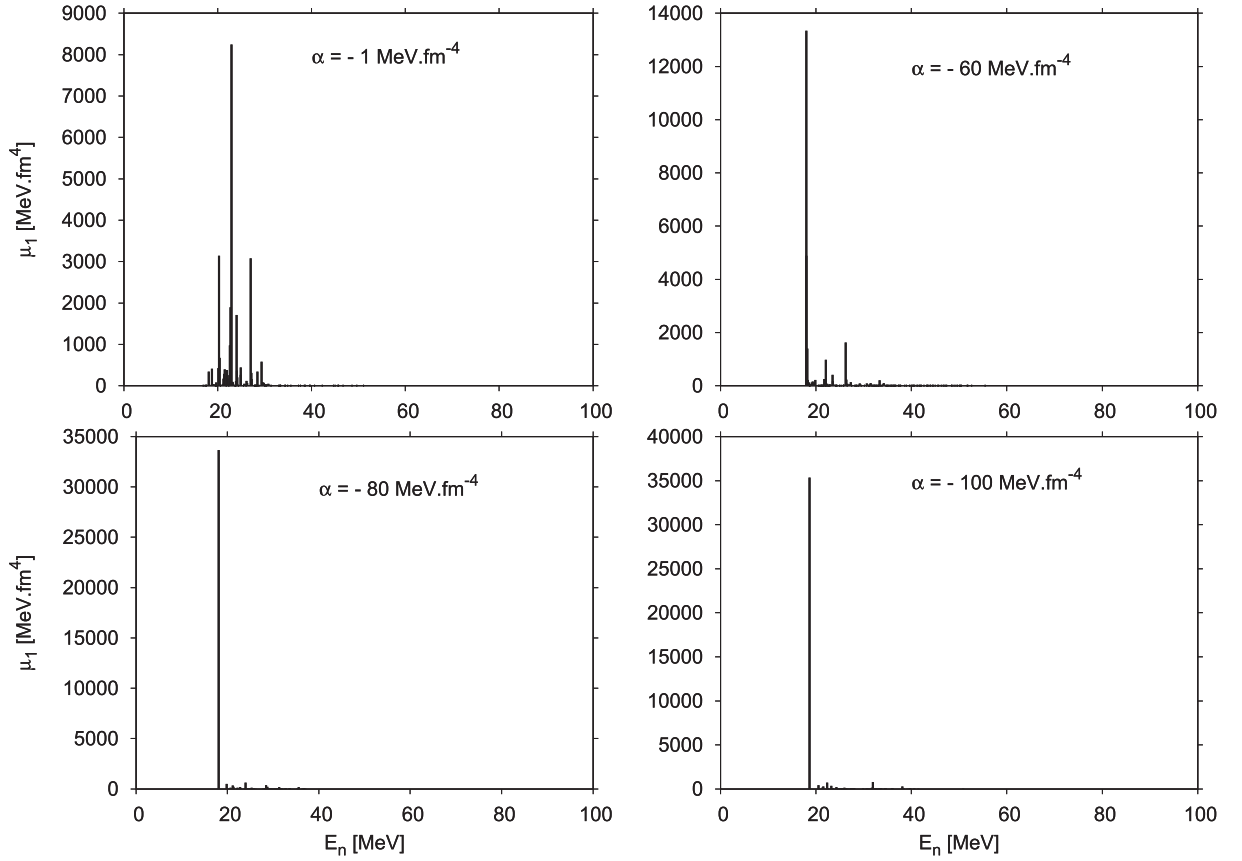


FIG. 4.3 – Contributions des différents états excités au moment d'ordre $k = 1$ pour différentes valeurs du paramètre α de l'intensité de la force QQ dans le cas de SkM^* avec la troncature sur les états HF $X_{QQ} = 40 \text{ MeV}$.

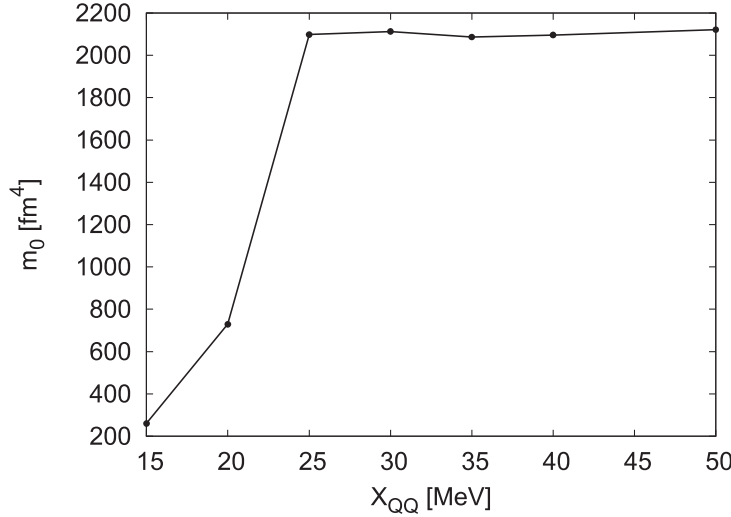


FIG. 4.4 – Moment m_0 (NEWSR) en fonction du paramètre de troncation sur les états à une particule, calculé avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{-4}$ de la force QQ .

pour les moments d'ordre $k = 0, 1$ (NEWSR et EWSR) sont présentés sur les figures 4.4 et 4.5 respectivement, en fonction de la taille X_{QQ} de la fenêtre.

À partir de ces figures, on peut remarquer que les moments augmentent quand on ajoute des états à une particule, puisqu'on ajoute progressivement des contributions aux moments. Ces résultats convergent à partir d'une taille $X_{QQ} = 35 \text{ MeV}$ le cas de m_1 , et de $X_{QQ} = 25 \text{ MeV}$ le cas de m_0 . La meilleure convergence de m_0 par rapport à m_1 pourrait être due au fait que m_0 est indépendante de l'énergie d'excitation.

Une autre façon d'illustrer les résultats de cette étude est de considérer l'effet de cette troncation sur la contribution au moment d'ordre $k = 1$, en fonction de l'énergie d'excitation. Les résultats obtenus (*cf.* figure 4.6) montrent qu'à partir de $X_{QQ} = 30 \text{ MeV}$, la résonance quadrupolaire devient stable.

À cette étape de notre travail, on peut retenir dans ce qui suit $X_{QQ}=40 \text{ MeV}$, comme valeur raisonnable pour la troncation sur les états à une particule, en vue de décrire les corrélations vibrationnelles dans le noyau ^{40}Ca .

4.2.3 Les états excités

Un autre test consiste en l'étude de l'effet de la troncation des états excités, sur les moments d'ordre $k = 0, 1, 3$, et les énergies associées E_k (*cf.* équation (3.6)). On remarque sur la figure 4.7 tout d'abord, que les énergies E_1, \bar{E} et E_3 vérifient les inégalités de Schwartz (voir section 4.5) soit $E_1 \leq \bar{E} \leq E_3$. D'un autre côté la convergence des énergies et des moments (*cf.* figure 4.8) est obtenue pour le même nombre d'états excités (~ 500), qui correspondent à une énergie d'excitation $E_n \leq 100 \text{ MeV}$, quelque soit la valeur de k considérée ici ($k = 0, 1, 3$). On peut donc conclure que 500 états excités sont suffisants pour décrire l'effet sur ces quantités des corrélations vibrationnelles.

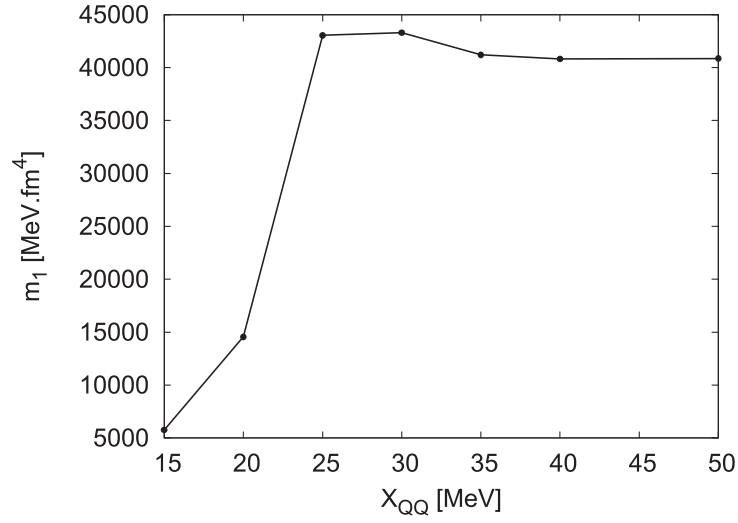


FIG. 4.5 – Moment m_1 (EWSR) en fonction du paramètre de troncation sur les états à une particule, calculé avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ .

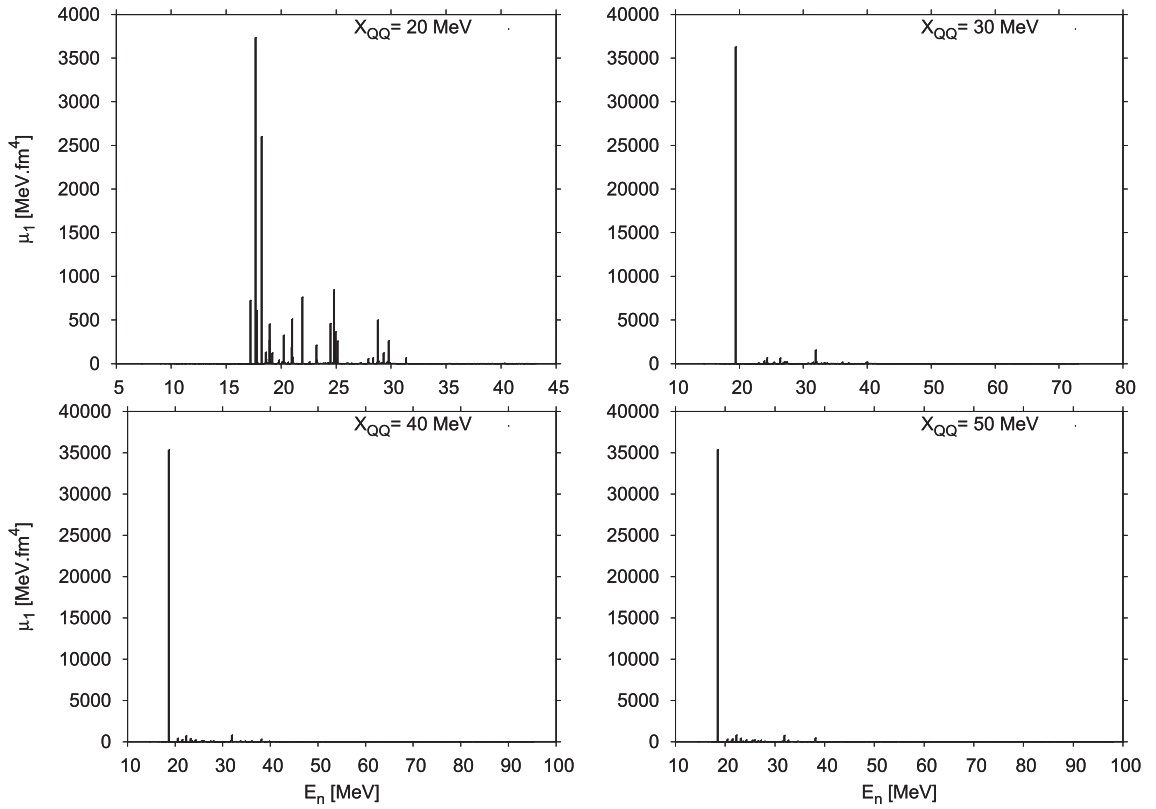


FIG. 4.6 – Contributions des différents états excités au moment d'ordre 1, pour différentes valeurs de troncations sur les états à une particule, le cas d'une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ .

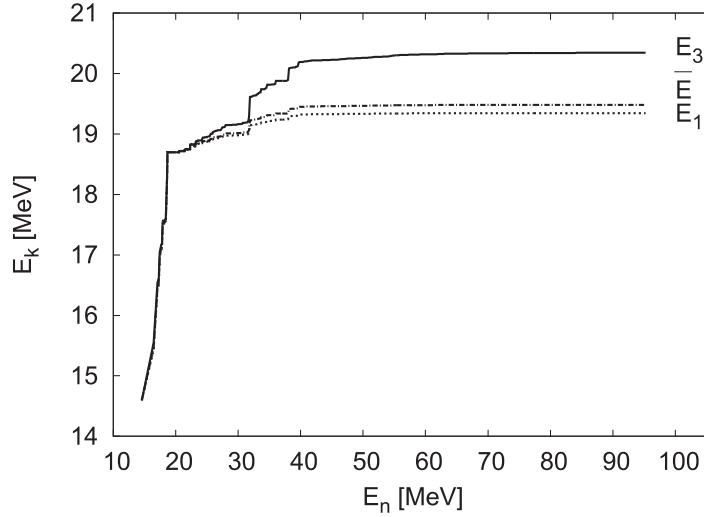


FIG. 4.7 – Convergence des énergies E_1, \bar{E}, E_3 dans le ^{40}Ca , par rapport à l'énergie d'excitation maximum E_n , des états excités considérés dans leurs calculs, avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ .

4.2.4 Nombre d'itérations dans la procédure de diagonalisation à la Lanczos

Comme il a été mentionné dans la section 4.11, nous avons utilisé un code de diagonalisation basé sur l'algorithme de Lanczos, qui a été développé par E.Caurier [88]. Dans ce code un paramètre important à contrôler est appelé Nloop. Il est lié au nombre d'itération de Lanczos. Son influence sur les résultats physiques a été discuté dans la référence [91] dans le contexte de l'étude des transitions de type Gamow-Teller dans le ^{48}Ca .

En augmentant Nloop les états propres que nous avons obtenus par diagonalisation sont de mieux en mieux convergés (*cf.* figure 4.9). Pour compenser partiellement la non-convergence (pour une valeur plus petite de Nloop, comme par exemple Nloop=100), on peut convoluer les résultats obtenus avec un facteur de forme gaussien (*cf.* équation (4.1)) avec même largeur que dans le cas convergé (Nloop=900 et largeur =0.5 MeV). Ceci, comme on le voit sur la figure 4.10, la différence en énergie et fragmentation entre les deux résultats.

De ce résultat, nous avons fixé Nloop=900 pour toute notre étude. Notons pour être complet que les résultats préliminaires que nous avons publiés dans la référence [41] ont été calculés avec Nloop=100 et un facteur de forme gaussien de largeur 0.6 MeV.

4.2.5 Les propriétés calculées de la résonance géante quadrupolaire isoscalaire

Après avoir fixé plusieurs paramètres du modèle et du calcul, comme l'intensité V_2^{QQ} , la troncation X_{QQ} sur les états à une particule, la convergence du processus de Lanczos

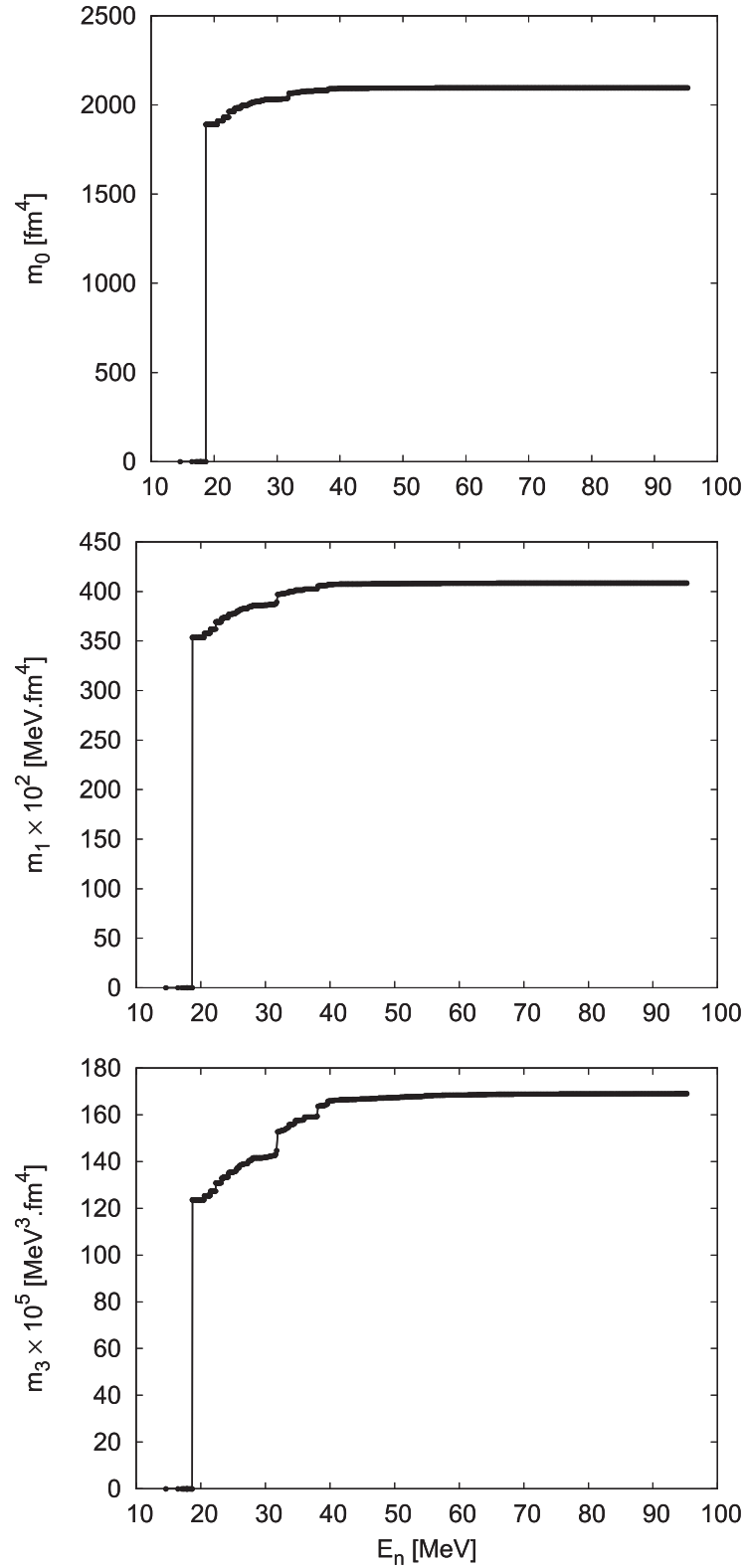


FIG. 4.8 – Convergence des moments m_0, m_1 et m_3 en fonction de l'énergie d'excitation maximale retenue, avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ de la force QQ .

4.2 Traitement des corrélations vibrationnelles dans le cas du ^{40}Ca

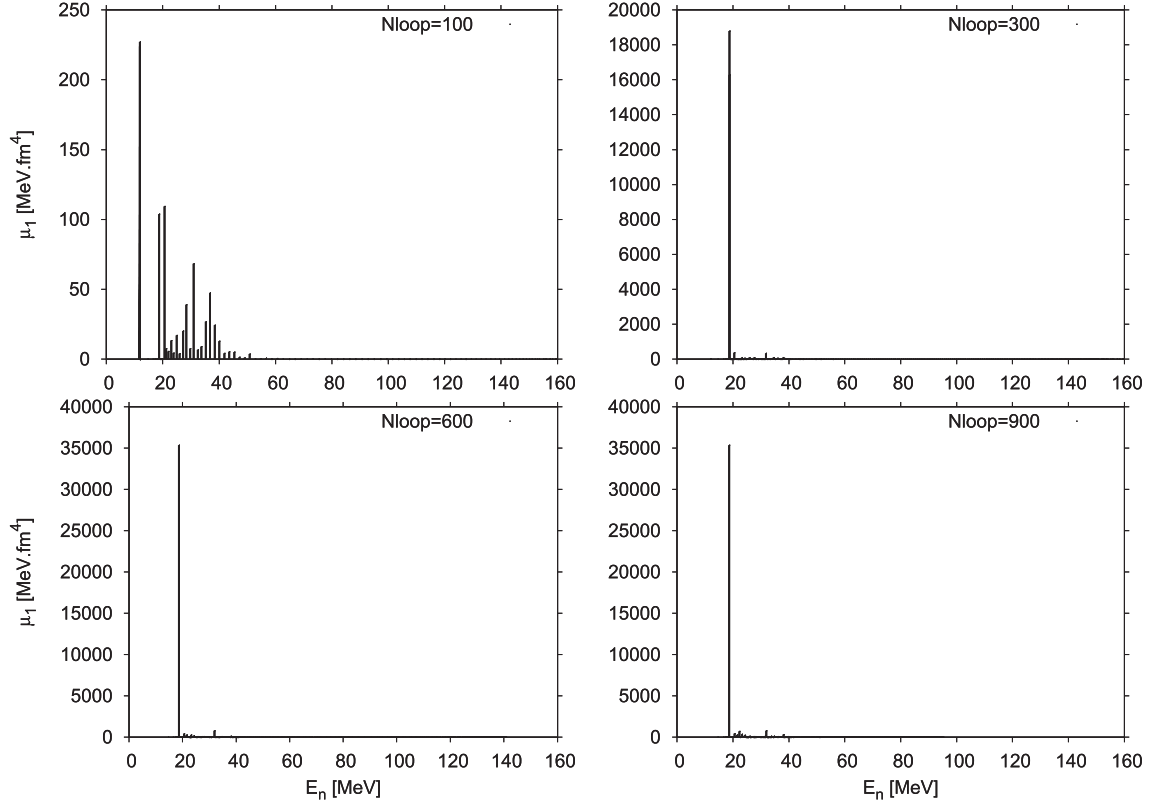


FIG. 4.9 – Effet du paramètre *Nloop* (nombre d'itérations de Lanczos) sur la fonction d'excitation de la RGQIS, avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force *QQ*.

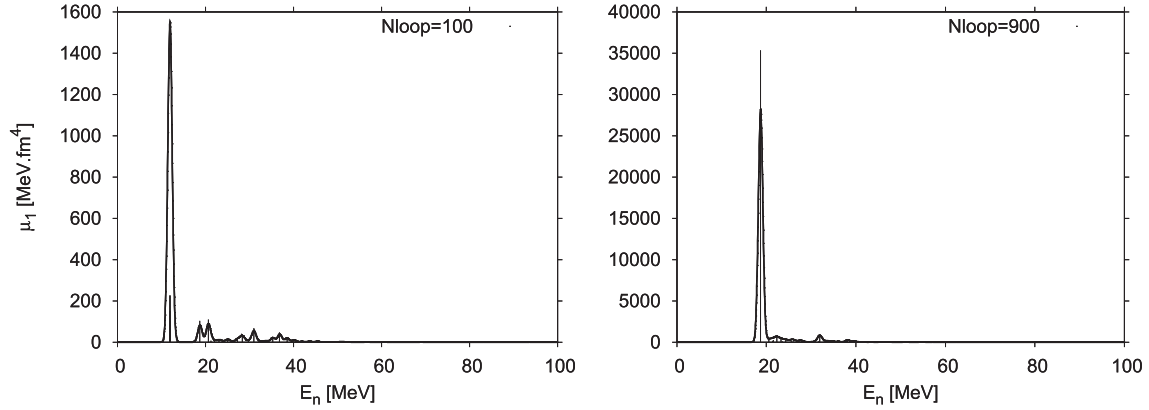


FIG. 4.10 – Convolution gaussienne de la fonction d'excitation dans le cas d'un calcul avec 900 itérations (la largeur de convolution est de 0.5 MeV) et dans le cas d'un calcul avec 100 itérations (la largeur est de 0.5 MeV), avec une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force *QQ*.

Nloop ...etc, la fonction d'excitation obtenue pour la RGQIS de ^{40}Ca et sa convolution à une gaussienne est reporté sur les figures 4.11 et 4.12 respectivement, pour les deux forces SIII et SkM*. Sur la figure 4.11 on identifie un pic bien prononcé qu'on appelle la résonance géante quadrupolaire isoscalaire (notée RGQIS) à une énergie d'excitation $E_n = 18.69$ MeV. Elle est pour l'essentiel le résultat d'excitations de type $2\hbar\omega$ (entre couches majeures de même parité).

Les propriétés de la RGQIS reportées dans la table 4.3 pour les deux forces, sont également comparées avec l'expérience et les résultats d'autres théories. Tout d'abord nos énergies, calculées à partir de HTDA, associées à la RGQIS et leurs largeurs sont en bon accord avec l'expérience. L'énergie moyenne notée \bar{E} obtenue avec SkM* est plus proche de l'expérience que celle obtenue avec SIII comme la montre la figure 4.13 (on notera que les auteurs de la référence [92] ont considéré $\bar{E} = m_1/m_0$ comme valeur de l'énergie de la RGQIS).

Comme on peut remarquer sur la table 4.3, nos résultats pour les largeurs Γ_2 du ^{40}Ca calculées avec les deux paramétrisations SkM* et SIII sont en très bon accord avec l'expérience. Le pourcentage des règles de somme satisfait par nos solutions est de l'ordre de 60 %.

Sur la figure 4.13, les énergies de la RGQIS calculées avec HTDA sont comparées avec l'expérience et avec une approche systématique simple, où l'énergie de la RGQIS varie avec A comme $E \sim 66A^{-1/3}$. On remarque que nos résultats pour le ^{40}Ca sont en bon accord avec l'expérience (ils en diffèrent par $1 \sim 2$ MeV). Ils sont, de même, en très bon accord avec la valeur systématique estimée à 19.30 MeV avec la formule $E = 66A^{-1/3}$.

Nous allons maintenant discuter l'origine de la différence des énergies de la RGQIS (0.92-1.12 MeV) pour une valeur de k donnée, entre les calculs utilisant les deux paramétrisations SkM* et SIII.

La masse effective (m^*/m) a, comme on sait [82], une influence sur les propriétés des résonances géantes quadrupolaires :

$$E \sim \sqrt{2\hbar\omega} \sqrt{m/m^*}.$$

Pour avoir des énergies de la RGQIS satisfaisant à $E \sim 63 - 66A^{-1/3}$ MeV, la masse effective doit être comprise entre $m^*/m \sim 0.75 - 0.85$.

Les masses effectives dans la matière nucléaire associées à SIII et SkM* valent respectivement 0.76m et 0.79m. Tout porte à penser que c'est cela qui est à l'origine de la différence des énergies de la RGQIS, pour les deux interactions de Skyrme utilisées.

Dans la table 4.4, nous avons reporté la quantité m^*/m correspondant à différentes valeurs des énergies E_1 , \bar{E} et E_3 (cf. table 4.3) comparée aux valeurs obtenues dans la matière nucléaire [13], pour les deux paramétrisations SkM* et SIII. L'accord est globalement bon, mais légèrement meilleur avec SkM* qu'avec SIII.

On peut conclure que SkM* est une bonne interaction effective à utiliser dans la partie du champ moyen HF de l'approche HTDA, pour calculer les RGQIS. En fait, l'interaction SkM dont SkM* dérive a été construite pour conduire à une telle reproduction de ces propriétés de RGQIS [11]. Dans ce qui suit nous avons choisi pour la partie HF de l'approche HTDA l'interaction effective SkM*.

4.2 Traitement des corrélations vibrationnelles dans le cas du ^{40}Ca

	E			Γ		%
	$E_1(\text{MeV})$	$\bar{E}(\text{MeV})$	$E_3(\text{MeV})$	$\Gamma_2(\text{MeV})$	$\Gamma_{\text{max}}(\text{MeV})$	%
SIII	20.30	20.47	21.46	3.36	3.48	61
SkM*	19.34	19.48	20.34	3.01	3.15	57
Exp. [92]	17.84 ± 0.43			2.89 ± 0.6		108 ± 12
Theo.	16.2 [93],	18.46 [54],	25.1 [94]			

TAB. 4.3 – Énergies E_k , largeurs, et pourcentages des règles de somme de l'excitation quadrupolaire du ^{40}Ca , avec les deux paramétrisations SIII et SkM*, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{-4}$ de la force QQ, comparés à l'expérience et aux résultats d'autres théories.

	SkM*	SIII
$m^*/m(E_1)$	0.77	0.69
$m^*/m(\bar{E})$	0.76	0.68
$m^*/m(E_3)$	0.69	0.62
$m^*/m(\text{nucl.matter})[13]$	0.79	0.76

TAB. 4.4 – Masse effective calculée avec les énergies E_1, \bar{E} et E_3 pour les deux paramétrisations SkM* et SIII, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{-4}$ de la force QQ, comparée à ce qu'on obtient dans la matière nucléaire infinie.

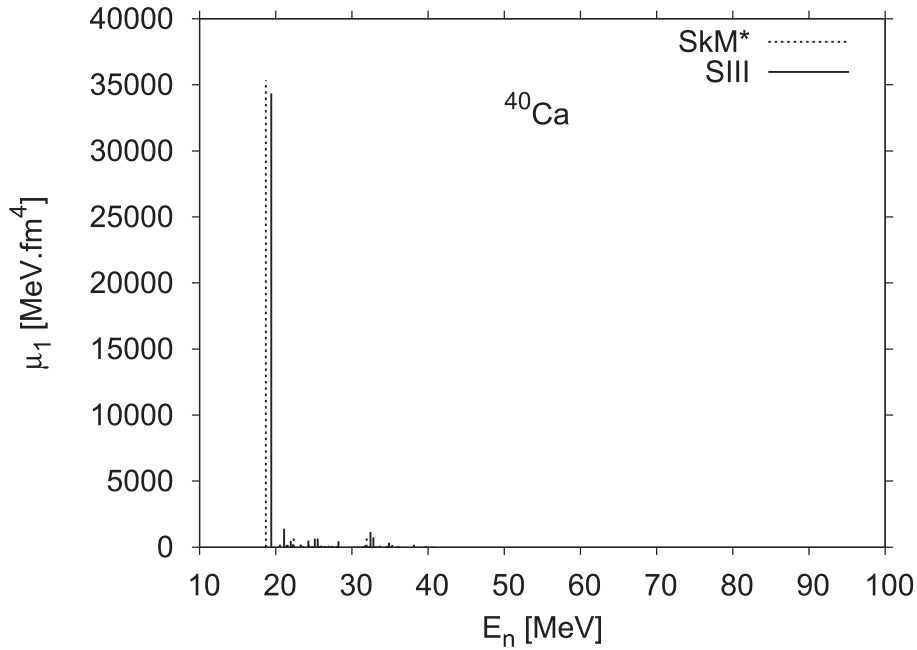


FIG. 4.11 – Fonction d'excitation pour le cas du ^{40}Ca dans les deux cas des paramétrisations SIII et SkM*, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{-4}$ de la force QQ.

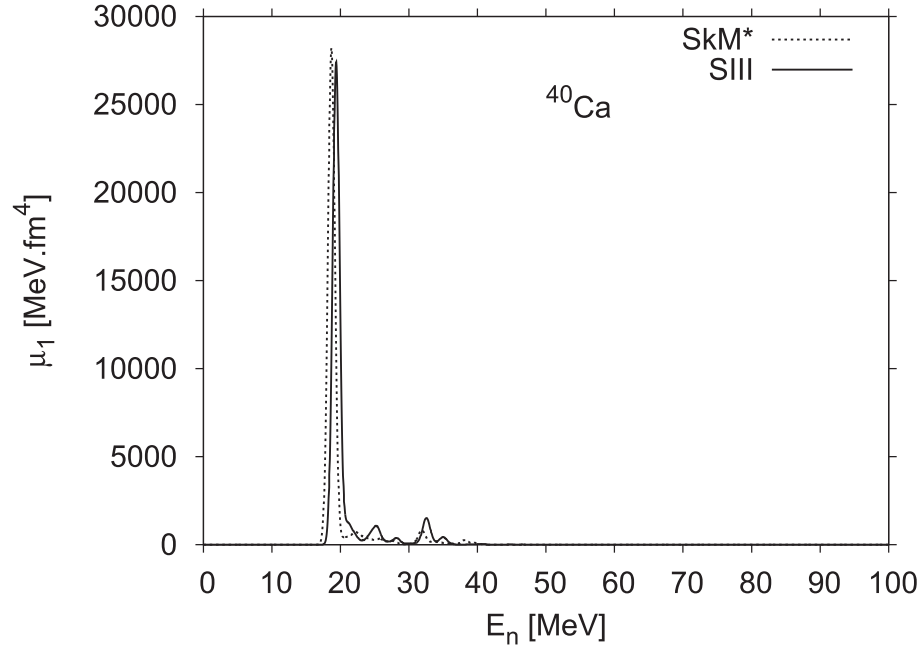


FIG. 4.12 – Convolution gaussienne (de largeur 0.5 MeV) de la fonction d'excitation du ^{40}Ca , dans le cas des deux forces SIII et SkM*, et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ.

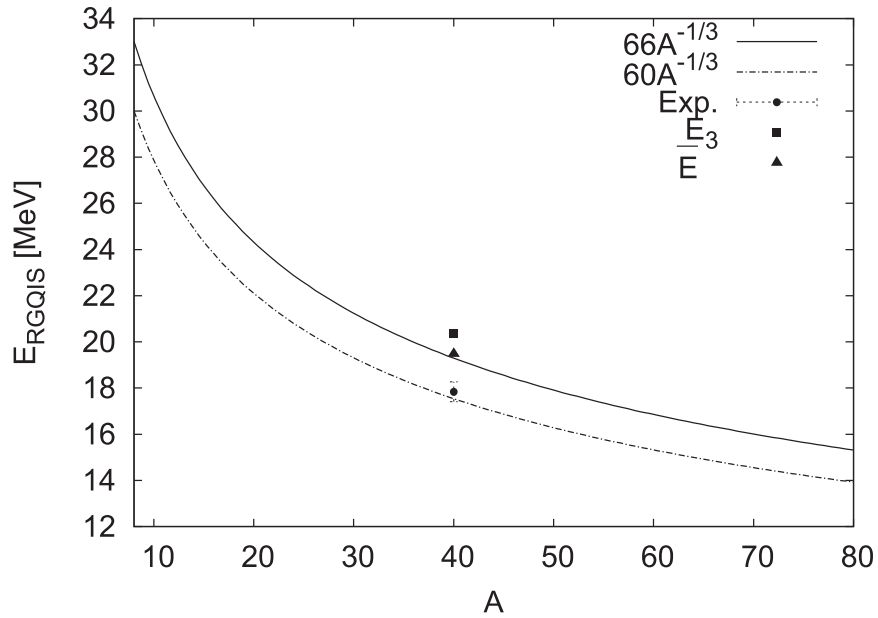


FIG. 4.13 – Énergies \bar{E} et E_3 de la RGQIS, calculées dans le cadre HTDA, comparées à l'expérience et aux deux estimations systématiques ($E = 60, 65A^{-1/3}$) MeV. La force SkM* et une intensité $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ ont été utilisées.

4.2.6 Conclusions

Cette première partie du traitement des corrélations vibrationnelles dans le cadre du formalisme HTDA pour le noyau doublement magique (et sphérique) ^{40}Ca , nous a permis de tirer les conclusions suivantes :

- Les excitations collectives de type $|(1p1h)_\nu(1p1h)_\pi\rangle$, et l'interaction neutron-proton jouent un rôle prépondérant dans le traitement des corrélations vibrationnelles, par rapport aux excitations des neutrons ou protons séparément.
- Il existe une forte dépendance de l'énergie du fondamental et des états excités par rapport à l'intensité de l'interaction quadrupolaire.
- La bonne convergence des moments m_0 (NEWSR), m_1 (EWSR) et les énergies E_k est cohérente avec le fait que notre approche HTDA vérifie raisonnablement bien les règles de somme dépendante linéairement et indépendante de l'énergie, malgré la non complétude de la base d'états.
- La présence d'un pic bien prononcé à une énergie d'excitation $E_n = 18.69$ MeV, qui correspond à une énergie $\bar{E} = 19.48$ MeV, avec une largeur de 3.02 MeV pour SkM*, (dont la masse effective est $m^*/m = 0.76$) est en bon accord avec l'expérience et la systématique.

Notre étude du ^{40}Ca n'est qu'un premier test simple de notre approche HTDA dans le traitement d'une partie des corrélations vibrationnelles, à savoir celles de type quadrupolaire. L'ajout d'excitations particule-trou d'ordre supérieur à $n, m = 1$, et celui des corrélations vibrationnelles d'ordre multipolaire supérieur à $\ell = 2$ demeurent des points à traiter dans un futur proche.

4.3 Traitement des corrélations d'appariement et des corrélations vibrationnelles dans le cas du ^{40}Ca

La deuxième étape de ce travail sur les corrélations vibrationnelles, a consisté en l'étude de l'inclusion en plus des corrélations vibrationnelles, des corrélations d'appariement et de son effet sur le fondamental autant que sur les états excités. Ici, en pratique, pour déterminer le champ moyen de notre approche HTDA non self-consistante partant d'un calcul HF+BCS, on a utilisé la paramétrisation SkM* (*cf.* section 4.2.5) comme interaction effective dans la partie de type HF. Pour la partie BCS on a utilisé la force de séniorité paramétrisée dans notre cas comme dans la référence [95] par

$$G = \frac{G_0^{(q)}}{11 + N_q} \quad \text{MeV}, \quad q = \{n, p\}$$

où N_q est le nombre de nucléons qui correspondent à un état de charge q , et $G_0^{(q)}$ est un paramètre fixant l'intensité de la force pour ce même état de charge.

À partir du quasi-vide obtenu par un calcul HF+BCS auto cohérent, nous construisons une base d'états à N particules, qui contient les mêmes excitations que dans la partie précédente (1p-1h) dans une grande fenêtre définie par $X_{QQ} = 40\text{MeV}$, en ajoutant des excitations des transferts des paires dans une petite fenêtre définie par $X_p = 6.5\text{MeV}$.

L'interaction résiduelle dans ce cas est l'interaction $\delta + QQ$, où l'interaction δ de courte portée traite les corrélations d'appariement avec conservation du nombre de particules, et l'interaction de longue portée QQ traite les corrélations vibrationnelles. Pour ces deux types de corrélation, on tient compte de toutes les interactions de deux nucléons : neutron-neutron, proton-proton et neutron-proton.

L'intensité de l'interaction δ est fixée par $\delta_{\nu\nu} = \delta_{\pi\pi} = \delta_{\nu\pi} = -300 \text{ MeV.fm}^3$ dans le canal $S = 0, T = 1$ et celle de l'interaction QQ est $V_{\nu\nu} = V_{\pi\pi} = V_{\nu\pi} = -100A^{-7/3}\text{MeV.fm}^{-4}$.

Notre but est d'étudier les conséquences de la présence simultanée des corrélations d'appariement et vibrationnelles, sur le fondamental et la RGQIS du ^{40}Ca .

Le fait d'avoir séparé ainsi l'interaction résiduelle en deux parties, où chacune décrit pour l'essentiel un type de corrélations, nous permet d'étudier l'effet de la variation de l'une par rapport à l'autre.

4.3.1 L'effet de l'intensité de l'interaction quadrupole-quadrupole

On s'est intéressé, premièrement, à l'effet de l'intensité de l'interaction QQ , sur le fondamental et la RGQIS du ^{40}Ca , en présence de corrélations de type appariement. La figure 4.14 représente la variation de l'énergie de corrélation du fondamental, en fonction de l'intensité de l'interaction QQ , pour différents cas d'interactions : δ , QQ , leurs sommes traitées séparément δQQ , et simultanément $\delta + QQ$.

À partir de cette figure, comme on attendait, l'énergie croît en fonction de l'intensité QQ pour les différentes interactions qui dépendent de cette dernière, sauf le cas de δ qui est une constante.

La deuxième remarque et la plus importante est la différence en énergie entre les deux cas δQQ et $\delta + QQ$. Cette différence est due au principe de Pauli qui interdit l'occupation d'un état sous l'effet d'un type de corrélation (exemple δ) qui est déjà occupé sous l'effet de l'autre type de corrélation (QQ)

Ce résultat illustre que l'approche HTDA permet un traitement unifié des deux types de corrélations vibrationnelles et appariement.

Nous avons présenté sur la figure 4.15, la probabilité d'occupation de différentes configurations (nm) , où $n, m \leq 2$, en fonction de l'intensité de la force QQ (voir pour plus de détail le tableau 4.5). On peut en déduire comme précédemment (*cf.* section 4.2.1), que plus l'intensité QQ augmente et plus l'effet des excitations simultanées de neutrons et de protons de type (11) devient dominant par rapport à celui attaché aux excitations des neutrons (10) seuls, ou des protons (01) seuls et même plus important, à celui attaché aux transferts de deux paires (22). Dans le cas d'une faible intensité de la force QQ , les transferts d'une paire neutron (20) ou proton (02) sont plus importants que les excitations de type (10), (01) et (22). Quand on augmente l'intensité de la force QQ , les probabilités d'excitation d'une paire (20 ou 02) diminuent, qui démarrent déjà faiblement (5%) à cause de la nature de notre noyau ^{40}Ca .

On compare sur la figure 4.16 les probabilités d'occupation du vide (00), et des états d'excitations de type (11) obtenues dans le cas $\delta + QQ$ et QQ seul. L'occupation du vide présente une différence entre les deux cas considérés qui varie entre 13% et 1%,

selon l'intensité V_2^{QQ} (quand l'intensité V_2^{QQ} augmente, la différence entre les deux cas vibrationnel et pairing+vibrationnel diminue). Cette différence revient à l'occupation des états par les transferts d'une paire (20) et (02).

L'effet de l'intensité de la force QQ sur la fonction d'excitation de la RGQIS du ^{40}Ca est présenté sur la figure 4.17. On note comme précédemment, qu'à faible intensité (entre $-1A^{-7/3}$ et $-40A^{-7/3}$ MeV.fm $^{-4}$) la présence d'un pic représentant la RGQIS et autour de ce pic, l'existence d'une fragmentation dans un intervalle d'énergie compris entre 20-30 MeV. L'effet le plus marquant est l'apparition d'un petit pic entre 0 et 10 MeV à une énergie d'excitation ~ 8.9 MeV, résultant des corrélations d'appariement. Cette fragmentation diminue jusqu'à disparaître pour de fortes intensité QQ où on obtient un seul pic bien prononcé persiste qui est typiquement analogue à celui obtenu dans le cas vibrationnel pur (sans appariement).

Sur la figure 4.18 on a combiné les résultats de la figure 4.17 calculés dans le cas d'une interaction ($\delta + QQ$) avec ceux obtenus en absence des corrélations d'appariement (*cf.* figure 4.3). On constate clairement qu'à faible intensité (par exemple $V_2^{QQ} = -40A^{-7/3}$ MeV.fm $^{-4}$), la différence entre les deux types de corrélations, réside surtout dans l'apparition des petits pics entre 0 et 10 MeV, qui sont le résultat d'excitations $0\hbar\omega$. Cette présence de pics devient de moins en moins visible en augmentant V_2^{QQ} , pour devenir négligeable pour une intensité $-80A^{-7/3}$ MeV.fm $^{-4}$. Dans ce cas, les deux pics deviennent pratiquement identiques pour les deux interactions QQ et $\delta + QQ$. Ceci indique qu'alors les corrélations vibrationnelles de type $2\hbar\omega$ deviennent dominantes.

On remarque sur la même figure, un léger décalage des pics de 300-600 KeV, quand on passe de l'interaction QQ à l'interaction $\delta + QQ$. Sur la figure 4.19 on a porté les énergies E_3 et \bar{E} de la RGQIS en fonction de l'intensité de l'interaction QQ pour les deux interactions QQ et $\delta + QQ$. La différence d'énergie entre les deux cas est significative mais reste faible. Ces énergies sont presque toujours supérieures dans le cas $\delta + QQ$, par rapport au cas QQ (sans appariement).

On peut remarquer que ces résultats dépendent pour une part du caractère particulier du noyau ^{40}Ca que l'on a étudié. Il est doublement magique, donc présente de faibles corrélations d'appariement. C'est pour cela que ce type de corrélations n'est apparent que dans le cas de faibles corrélations vibrationnelles. En augmentant ces dernières, l'effet d'appariement devient négligeable devant celui des corrélations vibrationnelles.

4.3.2 Les propriétés de la résonance géante quadrupolaire isoscalaire

Nous allons maintenant détailler certaines propriétés de la RGQIS du ^{40}Ca telles que, son énergie, sa largeur et son pourcentage de règle de somme, en tenant compte soit uniquement des corrélations quadrupolaires, soit en y ajoutant les corrélations d'appariement.

Les résultats obtenus pour différentes intensités (*cf.* table 4.6) montrent que les énergies \bar{E} et E_3 présentent un minimum pour une intensité $-80A^{-7/3}$ MeV.fm $^{-4}$ dans les deux

α	(00)	(10)	(01)	(11)	(20)	(02)	(22)
-1.	86.71	0.00	0.00	1.40	5.86	5.60	0.40
-20.	87.02	0.00	0.00	2.23	5.30	5.07	0.35
-40.	87.31	0.04	0.04	4.82	3.85	3.69	0.21
-60.	85.78	0.17	0.20	9.00	2.41	2.31	0.10
-80.	82.15	0.43	0.48	14.09	1.42	1.35	0.05
-100.	77.38	0.77	0.85	19.32	0.83	0.80	0.02
-120.	72.45	1.13	1.25	24.14	0.51	0.49	0.01

TAB. 4.5 – Probabilités d’occupation des états à N particules notés $(n\ m)$, pour différentes intensités de la force quadrupole-quadrupole, en présence d’une interaction δ d’intensité $V_0^{T=1} = -300\text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$.

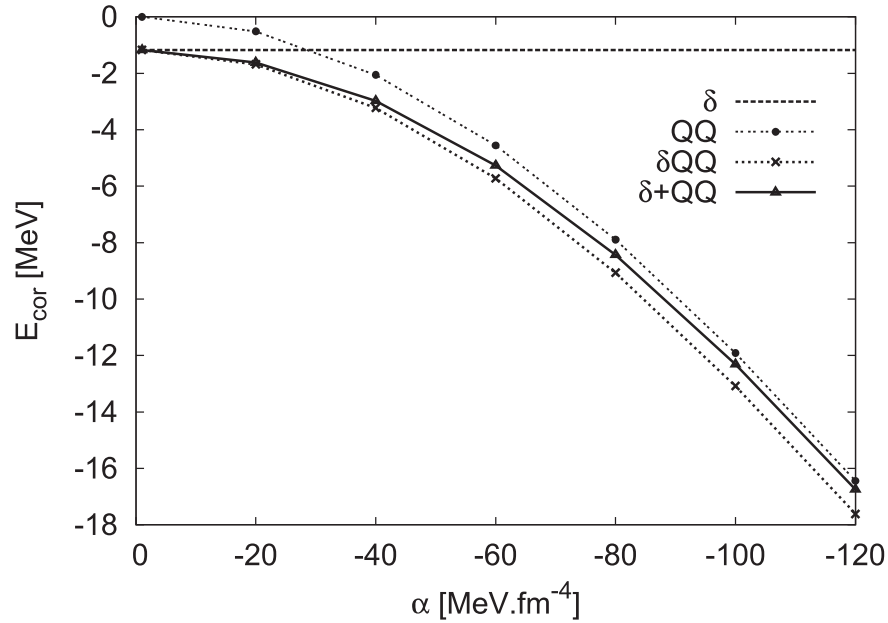


FIG. 4.14 – Variation de l’énergie de corrélation du fondamental, en fonction du paramètre α de l’intensité de la force QQ, dans les différents cas d’interactions résiduelles : δ , QQ, leurs sommes traitées séparément δ QQ, et simultanément δ + QQ avec une intensité d’appariement $V_0^{T=1} = -300\text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$.

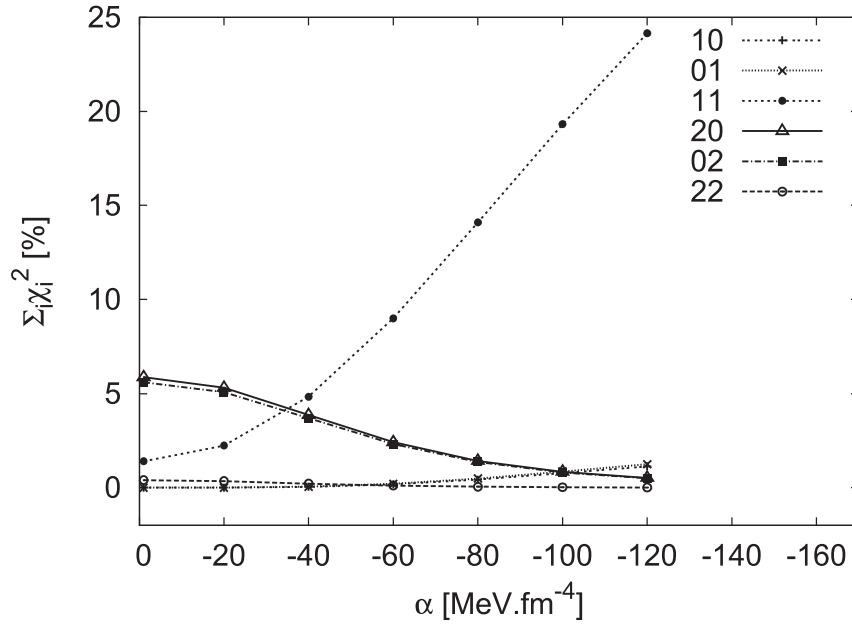


FIG. 4.15 – Probabilités d'occupation de différentes configurations (nm), en fonction du paramètre α l'intensité de la force QQ , dans le cas de l'interaction résiduelle $\delta + QQ$, avec une intensité d'appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.

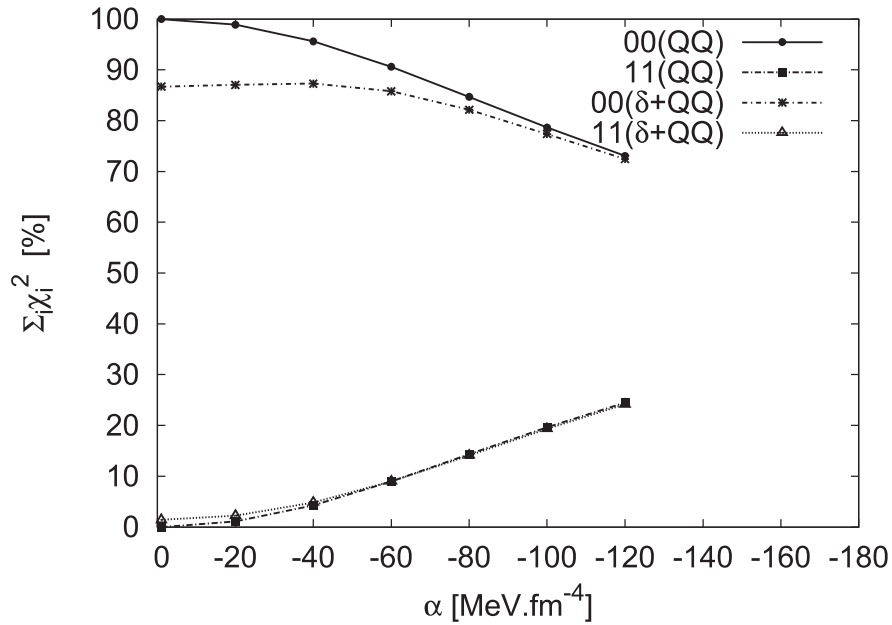


FIG. 4.16 – Comparaison de la probabilité d'occupation du vide (00) et des états d'excitation (11) dans les deux cas d'interactions résiduelles ($\delta + QQ$ et QQ) avec une intensité d'appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.

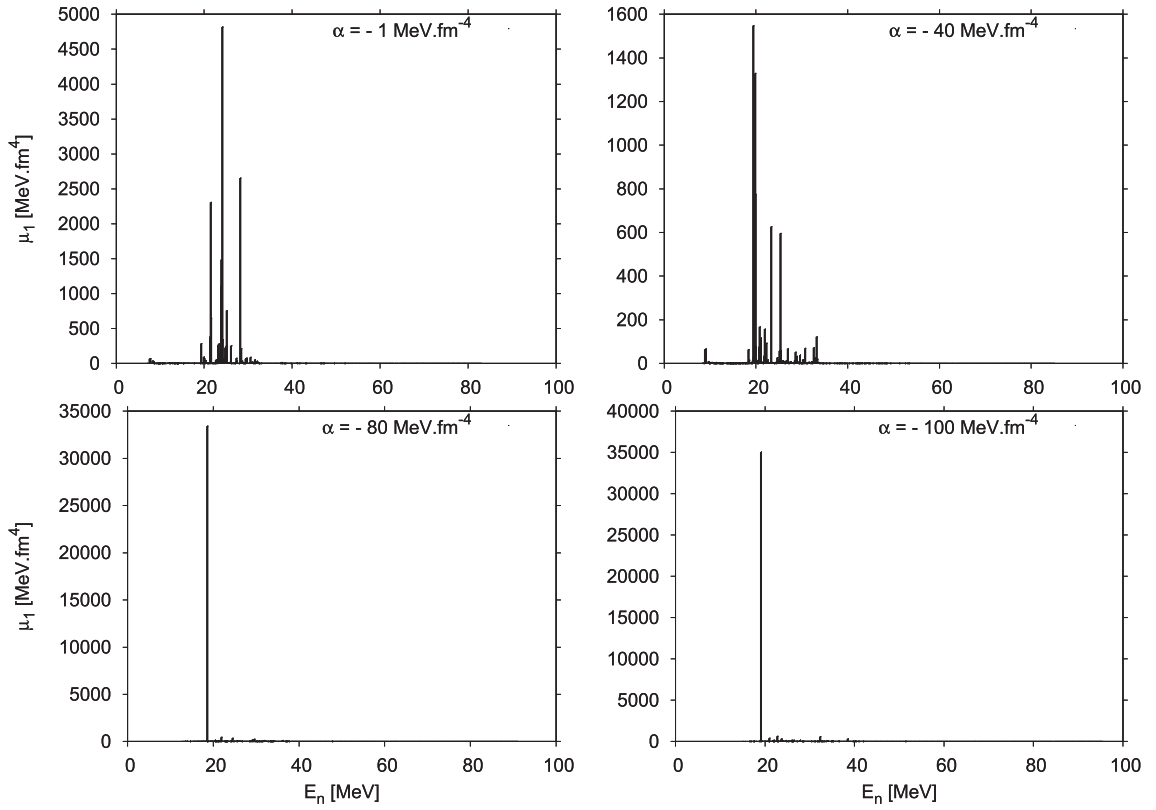


FIG. 4.17 – Fonction d’excitation du ^{40}Ca calculée dans le cadre HTDA avec l’interaction résiduelle $\delta + QQ$, pour différentes valeurs du paramètre α de la force QQ , et avec une intensité d’appariement $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.

	QQ				$\delta + QQ$			
	$\bar{E}(\text{MeV})$	$E_3(\text{MeV})$	Γ_2	%	$\bar{E}(\text{MeV})$	$E_3(\text{MeV})$	Γ_2	%
$-60A^{-7/3}$	19.29	20.55	3.55	38	20.34	21.62	3.96	17
$-80A^{-7/3}$	18.74	19.38	2.56	53	19.15	19.75	2.48	51
$-100A^{-7/3}$	19.48	20.34	3.02	57	19.78	20.55	2.86	56

TAB. 4.6 – Énergies \bar{E} , E_3 , largeurs et pourcentages, dans les deux cas d’interaction résiduelle $\delta + QQ$ et QQ pour différentes intensités V_2^{QQ} de la force QQ et une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$ de la force δ .

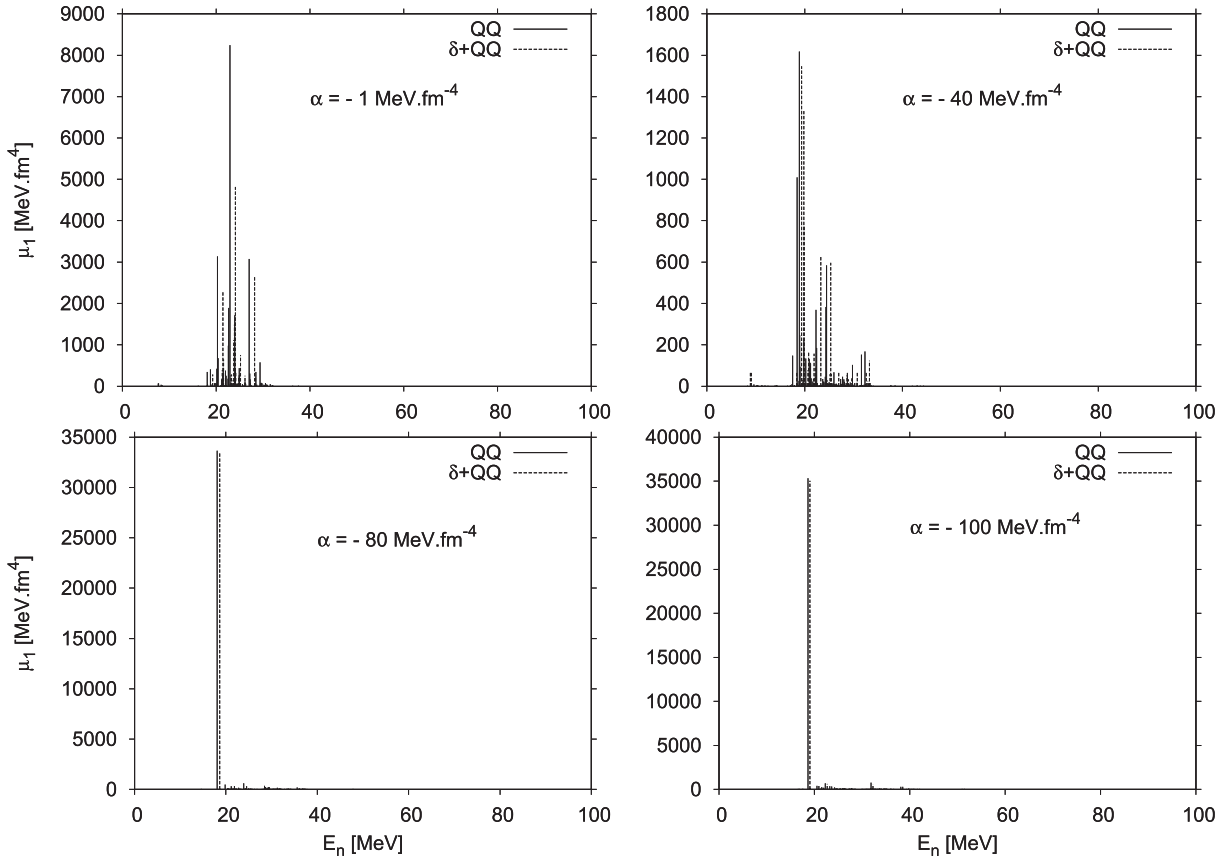


FIG. 4.18 – Sur cette Figure nous avons reporté les résultats de la figure 4.17 obtenus avec une interaction $(\delta + QQ)$ avec ceux obtenus sans interaction δ (interaction QQ seule). L'intensité d'appariement dans ce cas est $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.

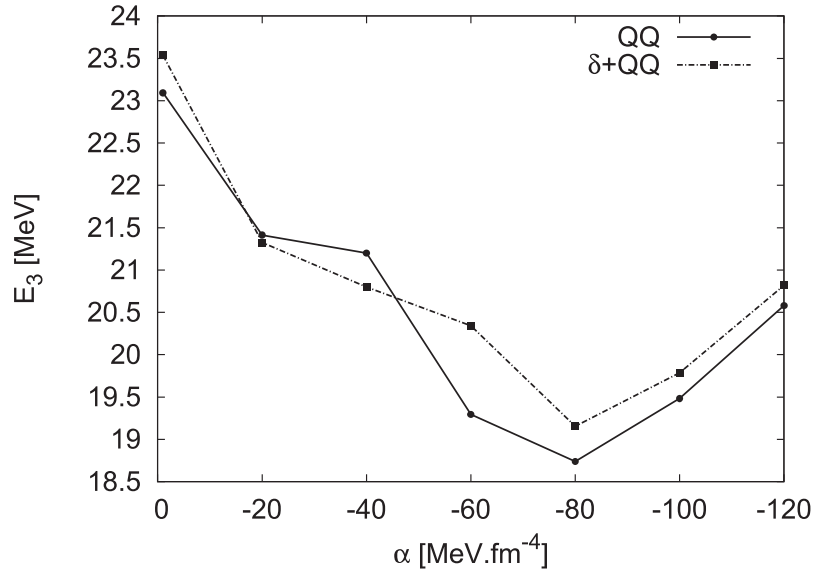


FIG. 4.19 – Variation de l'énergie E_3 de la RGQIS du ^{40}Ca en fonction du paramètre de l'intensité de l'interaction QQ dans les deux cas d'interaction résiduelle (QQ et $\delta + QQ$). L'intensité d'appariement est $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$.

cas étudiés. De même un minimum pour la même valeur d'intensité est observé pour la largeur Γ_2 . Nous n'avons pas d'explication pour ce résultat.

Comme il a été déjà mentionné (section précédente) pour une intensité donnée, les énergies dans le cas de la présence de corrélations d'appariement sont plus élevées qu'en leur absence.

Les règles de somme sont satisfaites, à peu près dans les mêmes proportions dans les deux cas considérés. Le pourcentage devient important ($\sim 60\%$) pour une forte intensité de l'interaction QQ dans les deux cas d'interaction résiduelle ($\delta + QQ$ et QQ). Il dépend du choix du paramètre de convergence de Lanczos (*cf.* la figure 4.20). En pratique et pour des raisons numériques, on n'a pas pu aller au delà de la valeur de Nloop=900.

4.3.3 Effet des corrélations d'appariement neutron-proton

Appariement isovecteur

Dans cette partie, on s'intéresse à l'effet de l'appariement entre deux nucléons indépendamment de leurs états de charge. Dans un premier temps, nous ne considérons qu'une interaction δ dans le seul canal $T=1$ (donc $S=0$). À cet effet, nous avons reporté sur la figure 4.21, pour diverses intensités de la force QQ , l'énergie de corrélation de l'état fondamental en fonction de l'intensité de l'interaction δ , correspondant à des valeurs $V_0^{T=1}$ identiques pour les cas $\nu - \nu, \pi - \pi, \nu - \pi$.

On peut remarquer que, dans tous les cas, en augmentant l'intensité d'appariement $V_0^{T=1}$, on augmente l'énergie de corrélation du fondamental, comme il était attendu. Néanmoins, il est intéressant de noter que le surcroît d'énergie de corrélations décroît quand

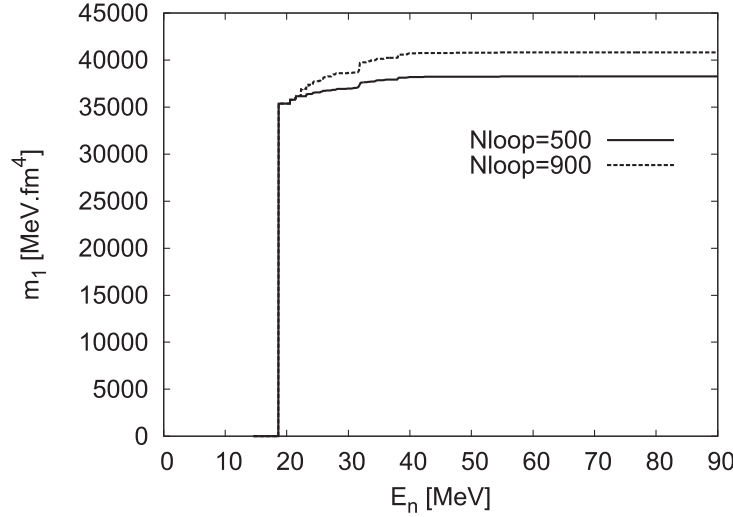


FIG. 4.20 – Différence entre le moment d'ordre $k = 1$ pour deux valeurs de convergence à la Lanczos 900 et 500, pour le même nombre d'états excités (500), avec les intensités $V_2^{QQ} = -100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ et $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$ des deux forces QQ et δ respectivement.

on augmente l'intensité de l'interaction QQ

Les probabilités d'occupation du fondamental corrélé HTDA qui correspondent au quasi-vide (00), aussi que les états d'excitations $(nm) = (11), (20), (02), (22)$, en fonction de la variation de l'intensité $V_0^{T=1}$, pour différentes intensités de la force QQ sont présentées dans les figure 4.22 et 4.23 respectivement.

On remarque que quelque soit l'intensité de la force QQ , la probabilité du fondamental (00) diminue, quand on augmente l'intensité $V_0^{T=1}$ (cf. figure 4.22).

On note aussi (cf. figure 4.23) que plus on augmente l'intensité de la force QQ , plus les états (11) contribuent. Leurs pourcentages varient de 5-20%, mais restent presque constants en fonction de l'intensité de la force δ . Cette dernière a plus d'effet sur les transferts d'une paire neutron ou proton, et de deux paires, comme il fallait s'y attendre.

L'énergie E_3 de la RGQIS est présentée sur la figure 4.24. À faible intensité de la force QQ , la variation de E_3 avec l'intensité d'appariement n'est pas régulière pour les basses valeurs de l'intensité V_2^{QQ} . Pour de plus hautes valeurs de V_2^{QQ} cette énergie a un comportement plus régulier avec $V_0^{T=1}$.

On peut expliquer ce comportement irrégulier de l'énergie E_3 , par les résultats de la figure 4.25, où nous avons montré la variation de la fonction d'excitation pour une intensité V_2^{QQ} de la force QQ égale à $-40A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$, en fonction des intensités d'appariement $V_0^{T=1}$. Celle-ci montre la quasi-disparition des fragmentations au delà du pic principal, en augmentant $V_0^{T=1}$ de 100 MeV.fm^3 à 500 MeV.fm^3 . Ces modifications des contributions à haute énergie ont évidemment un effet fort sur m_3 (à cause de l'ordre élevé du moment) donc sur E_3 . En outre l'énergie du seul pic qui subsiste à haute valeur de $V_0^{T=1}$ se décale en fonction de ce dernier paramètre lentement vers les plus hautes énergies. Il y a donc conjonction de deux effets : lente augmentation de l'énergie du

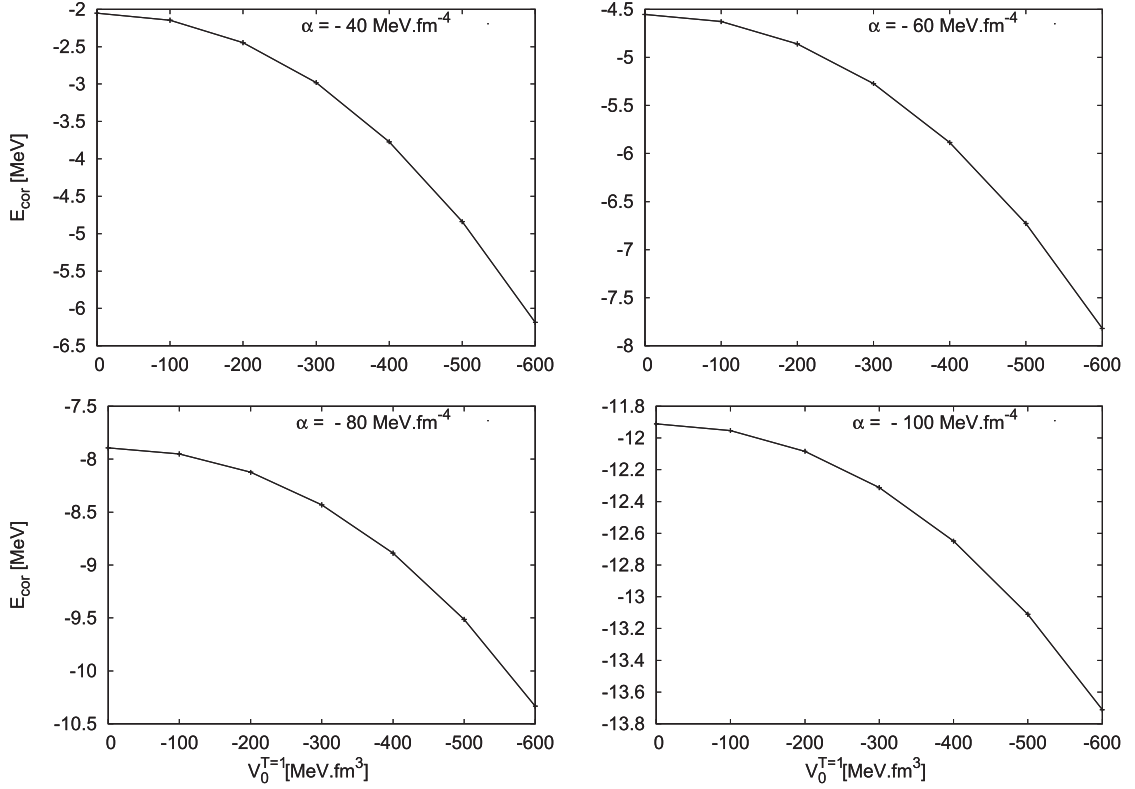


FIG. 4.21 – Énergie de corrélation du fondamental en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur $V_0^{T=1}$ (identiques pour les paires $(\nu\nu)$, $(\pi\pi)$ ou $(\nu\pi)$), pour différentes valeurs du paramètre de l'intensité de l'interaction QQ .

pic de la résonance géante et disparition des fragments à haute énergie. Ces deux effets expliquent le minimum observé à $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$. À partir de cette dernière valeur de l'intensité d'appariement, le seul effet qui contribue est le décalage du pic central, ce qui conduit dès lors à l'accroissement régulier de l'énergie E_3 .

Appariement isocalaire

Nous allons également tenir compte maintenant de l'interaction d'appariement de type isocalaire entre neutrons et protons, où les neutrons et les protons se couplent à un spin $S=1$ donc $T=0$ (fonction de spin symétrique) (*cf.* figure 3.2). En suivant la même procédure que celle employée dans la section précédente, on a varié l'intensité isocalaire dans le canal $T=0$ ($V_{0\nu\pi}^{T=0}$), par rapport à celle du canal $T=1$, où cette dernière est fixée à $V_{0\nu\nu} = V_{0\pi\pi} = V_{0\nu\pi} = -300 \text{ MeV.fm}^3$. Dans ce qui suit, on notera par X le rapport entre les deux intensités d'interaction neutron-proton dans les deux canaux $T=1$ et $T=0$ ($X = V_{0\nu\pi}^{T=0}/V_{0\nu\pi}^{T=1}$).

Les résultats concernant les propriétés de l'état fondamental en fonction du paramètre X sont reportés sur les figures 4.26, 4.27 et 4.28, pour deux valeurs de l'intensité de la force QQ : $-40A^{-7/3}$ et $-100A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$.

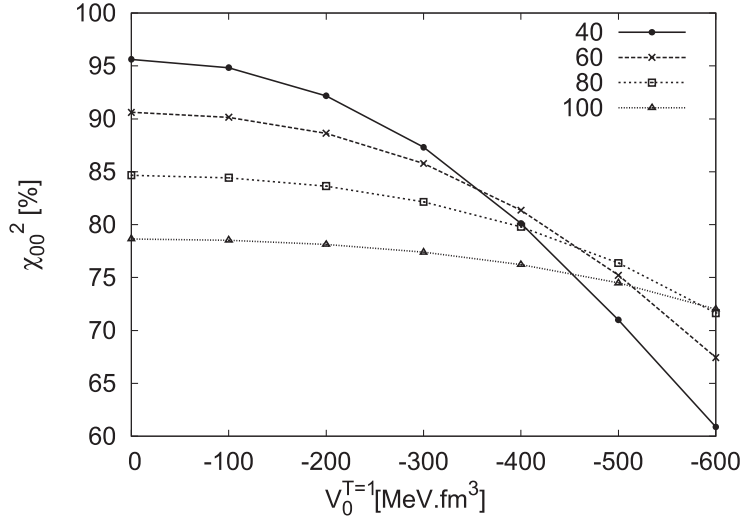


FIG. 4.22 – Variation de la probabilité d'occupation du vide (00) en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur, pour différentes valeurs du paramètre $|\alpha|$ de l'intensité de la force QQ .

La figure 4.26 montre la variation de l'énergie de corrélation du fondamental, en fonction du paramètre X , dans les deux cas $T=0$ et T quelconque (i.e $T=0$ et $T=1$). On peut observer qu'augmenter la contribution de l'appariement isoscalaire, conduit à diminuer l'énergie du fondamental, quelque soit l'intensité de la force QQ . La différence d'énergies de corrélation entre les deux cas ($T=0$, $T=0$ et $T=1$) diminue légèrement en fonction de X .

Sur les figures 4.27 et 4.28 nous avons reporté les probabilités d'occupation de différentes composantes de l'état fondamental, à savoir le quasi-vide et les états d'excitation de type $(nm) = (11), (20), (02)$ respectivement, en fonction du même paramètre X . À partir de la figure 4.27, on peut remarquer qu'à faible intensité de la force QQ ($V_2^{QQ} = -40A^{7/3}$), le pourcentage du vide augmente faiblement jusqu'à $X = 0.5$ puis diminue. Les grandeurs des probabilités des états d'excitation (11) et les transferts d'une paire neutrons (20) ou protons (02) restent comparables entre elles (*cf.* tableau 4.7). Elles varient peu avec X sauf pour les excitations de type (11) qui croissent fortement au delà de $X = 1$.

L'effet de l'inclusion de la partie $T=0$ d'appariement est moins apparente dans le cas d'une forte intensité de la force QQ : les probabilités d'occupations soit du vide (*cf.* figure 4.27) soit des états d'excitation (*cf.* figure 4.28) varient faiblement.

Les résultats d'une étude comparable (en fonction de X) des énergies E_3 et \bar{E} de la RGQIS du ^{40}Ca sont reportés sur la figure 4.29. On remarque que les énergies E_3 et \bar{E} sont presque constantes, en présence d'interaction agissant dans les deux canaux $T=1$ et $T=0$. Dans le seul canal $T=0$, la variation de X conduit à une légère augmentation de l'énergie de la RGQIS.

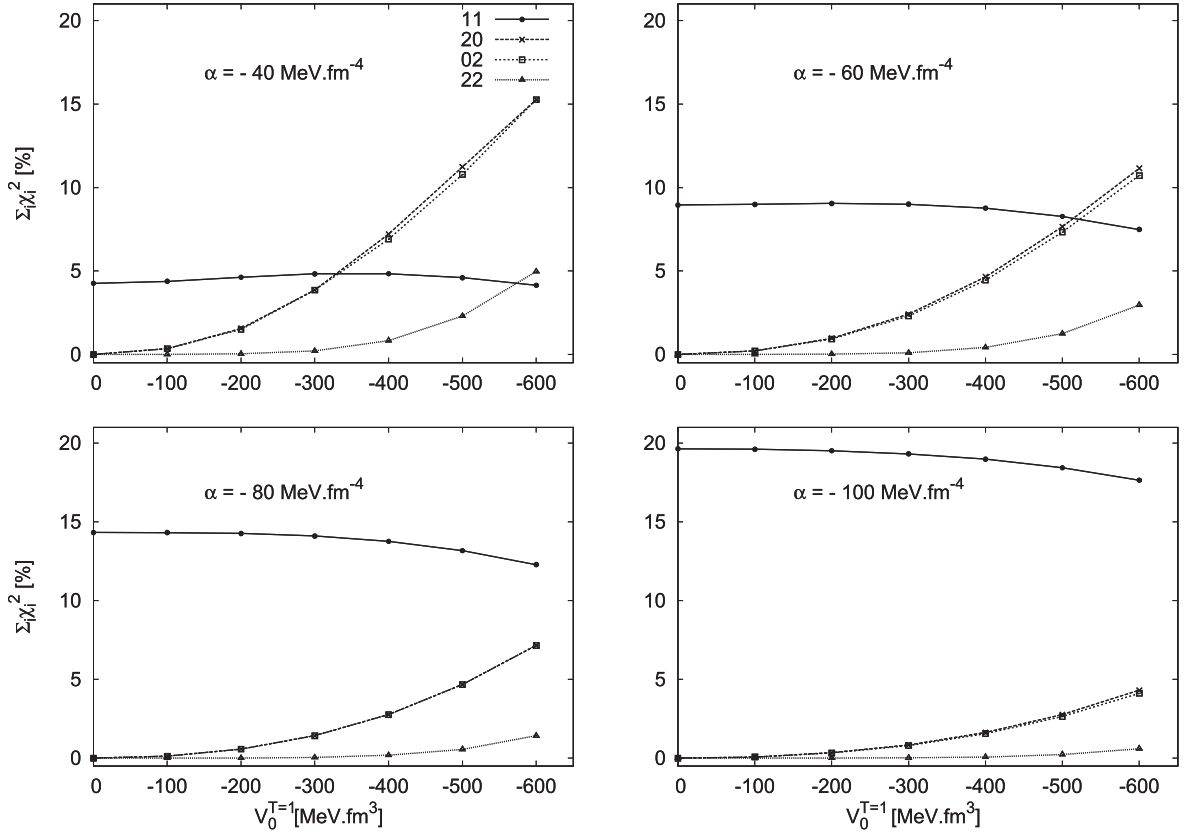


FIG. 4.23 – Les probabilités des états de type $(nm) = (11), (20), (02), (22)$ en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur $V_0^{T=1}$, pour différentes valeurs du paramètre α de la force QQ .

X	(00)	(11)	(20)	(02)	(22)
0	87.31	4.83	3.86	3.69	0.21
0.5	87.46	4.68	3.85	3.68	0.22
1	87.34	4.93	3.79	3.62	0.22
1.5	86.93	5.56	3.68	3.51	0.22
2	86.26	6.55	3.53	3.35	0.23
2.5	85.33	7.84	3.34	3.17	0.23

TAB. 4.7 – Probabilité d'occupation de différente composition de l'état fondamental pour une intensité $V_2^{QQ} = -40 A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ , et une intensité d'appariement fixe $V_0^{T=1} = 300 \text{ MeV.fm}^3$.

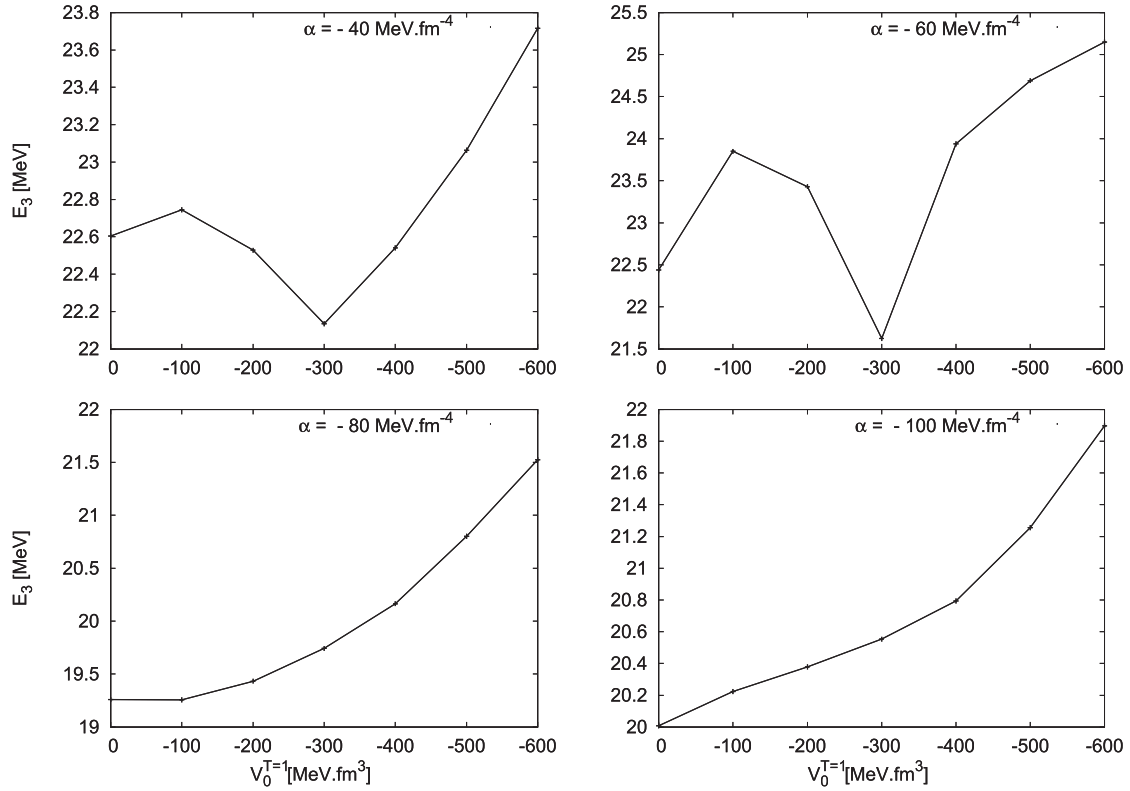


FIG. 4.24 – Figure analogue à la Figure 4.23, pour l'énergie E_3 de la RGQIS en fonction de l'intensité d'appariement isovecteur $V_0^{T=1}$, (identiques pour les paires $(\nu\nu)$, $(\pi\pi)$ ou $(\nu\pi)$), pour différentes intensités de l'interaction QQ

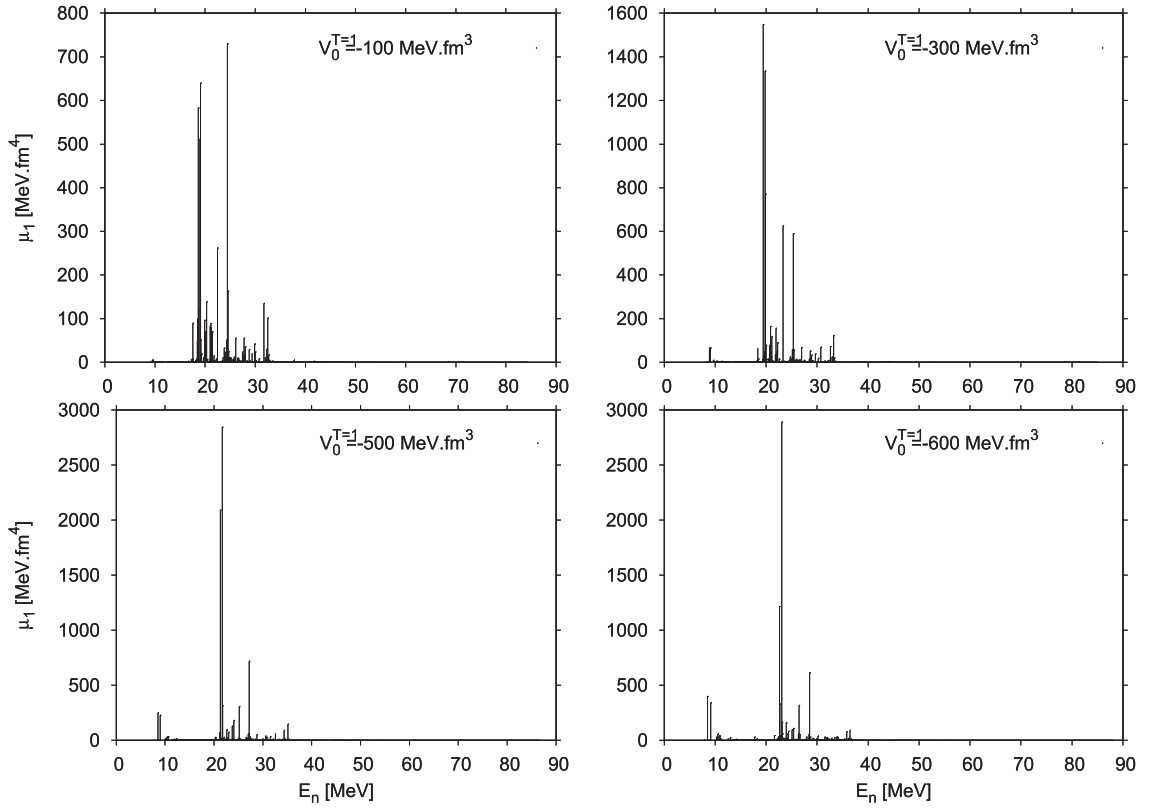


FIG. 4.25 – Fonction d'excitation pour différentes intensités d'appariement $V_0^{T=1}$, dans le cas d'une intensité $V_2^{QQ} = -40A^{-7/3} \text{ MeV.fm}^{-4}$ de la force QQ .

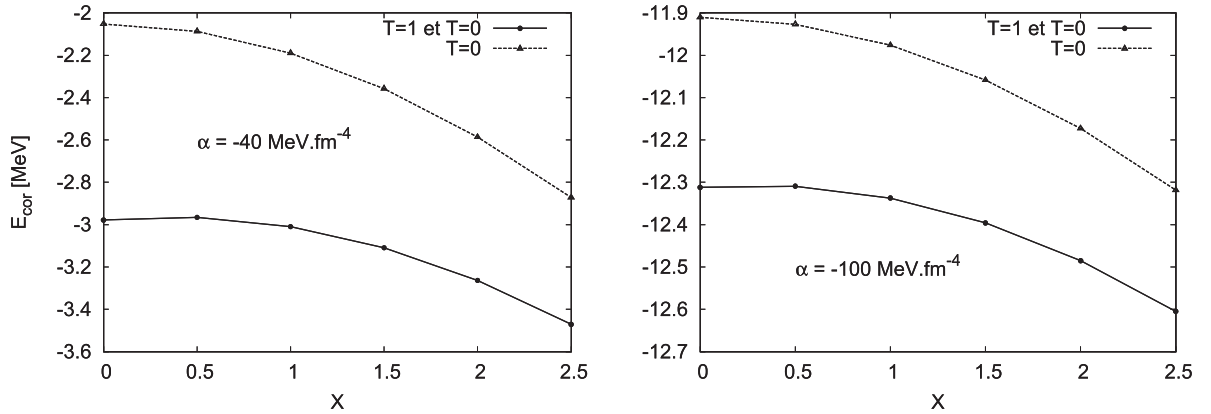


FIG. 4.26 – Variation de l'énergie de corrélation en fonction du paramètre X , rapport entre les deux intensités $V_0^{T=0}$ et $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, pour deux valeurs de l'intensité de la force QQ .

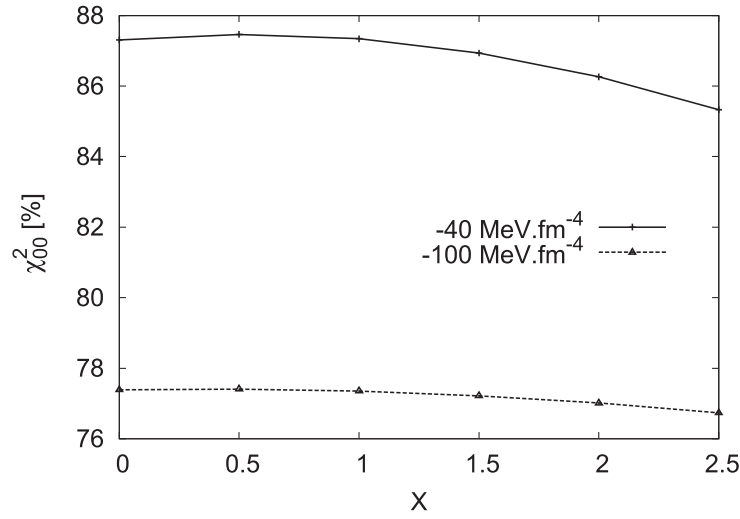


FIG. 4.27 – Probabilité d’occupation du vide en fonction du paramètre X (voir légende figure 4.26), avec une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, et pour deux cas d’intensités de la force QQ .

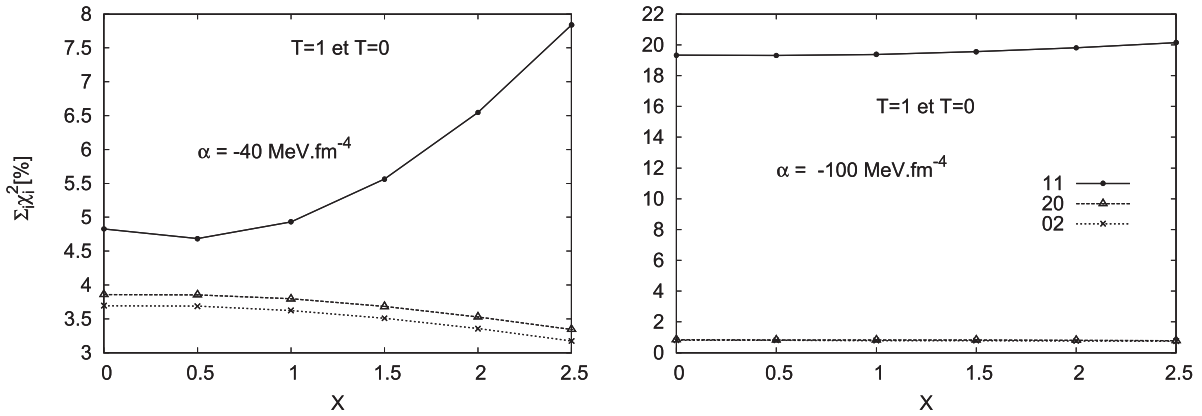


FIG. 4.28 – Variation de la probabilité d’occupation des états $(nm) = (11), (20), (02)$ en fonction du paramètre X (voir légende figure 4.26), avec une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV.fm}^3$, et pour deux cas d’intensités de la force QQ .

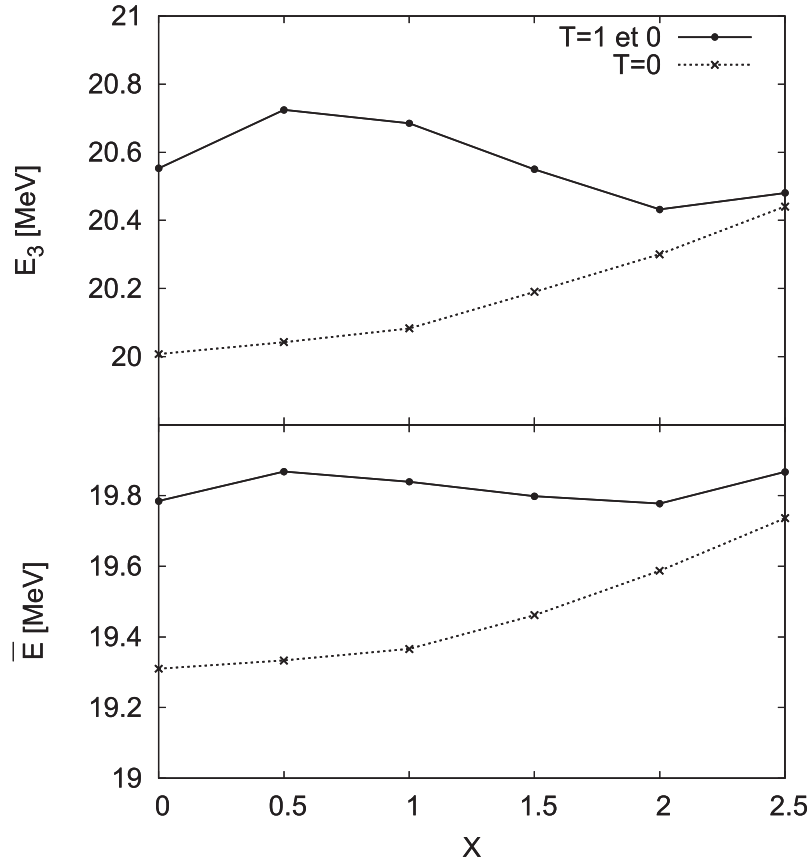


FIG. 4.29 – Variation de l'énergie de la RGQIS en fonction du paramètre X , régulant le rapport des intensités isoscalaire et isovecteur (voir légende figure 4.26), avec une intensité $V_0^{T=1} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$, et pour une intensité $V_2^{QQ} = -100 A^{-7/3} \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-4}$ de la force QQ .

4.3.4 Conclusions

Le traitement simultané des corrélations d'appariement et vibrationnelles, dans le cadre du formalisme HTDA sur le noyau ^{40}Ca , nous a permis de mettre en évidence les points suivants :

- L'effet des corrélations d'appariement sur l'état fondamental ou les états excités est beaucoup plus fort à faible intensité de la force QQ . Ces corrélations, restent, pour ce noyau, néanmoins faibles devant les corrélations vibrationnelles. Cet effet se traduit par la présence de fragmentations résultant d'excitation de type $0\hbar\omega$ et $1\hbar\omega$, et par un léger décalage du pic majeur. Cette présence des pics devient de moins en moins apparente en augmentant l'intensité de la force QQ , jusqu'à où la RGQIS devient analogue à celle obtenue avec les seules corrélations vibrationnelles.
- En augmentant l'intensité de la force QQ , la contribution des excitations collectives de type (11) dans l'état fondamental devient de plus en plus importante par rapport à celle des transferts d'une paire neutron ou proton et de deux paires.
- Les énergies de la RGQIS sont plus élevées en présence de corrélations d'appariement, mais les règles de somme restent satisfaites de façon analogue pour les deux types d'interactions résiduelles considérées (QQ et $\delta + QQ$).
- Les deux composantes d'appariement neutron-proton (isovecteur et isocalaire) jouent un rôle important dans la description de l'état fondamental. La force d'appariement $T=1$ a plus d'effet sur l'énergie de la RGQIS que la composante $T=0$.

Deuxième partie

SYSTÈME DE FERMIONS PIÉGÉS PAR UN POTENTIEL HARMONIQUE EN PRÉSENCE D'UN CHAMP MAGNÉTIQUE UNIFORME

Chapitre 5

ÉTUDE D'UN GAZ DE FERMIONS

L'étude des propriétés des systèmes dit à dimensions réduites présente un intérêt considérable. En effet, les progrès réalisés en nanotechnologie permettent, de nos jours, la réalisation de systèmes d'électrons se déplaçant dans un plan sous l'effet d'un potentiel d'oscillateur harmonique (OH). Ce quantum dot est souvent appelé atome artificiel. Dans un contexte différent, on a pu expérimentalement, grâce aux techniques de piégeage et de refroidissement, obtenir des gaz d'atomes ultra-froids [96] dans un piège harmonique. Le système ainsi obtenu est un candidat idéal à l'échelle mésoscopique pour étudier les propriétés quantiques telles les effets de couches dans la densité de particules. Sur le plan expérimental le potentiel d'oscillateur harmonique confinant, peut être manipulé afin d'obtenir des configurations du système à une dimension (1D) où à deux dimensions (2D).

Plusieurs travaux théoriques ont été réalisés dans le cadre d'études d'un gaz de fermions ou de bosons piégés dans un OH de dimension arbitraire D , et à une température T finie [97, 98] ou à température zéro [99, 100, 101, 104]. Les mêmes études ont porté sur les mêmes systèmes dans un champ magnétique uniforme à température finie [106] ou à température zéro [105]. Les derniers travaux de Shea et Van Zyl [107, 108, 109] ont porté sur l'étude d'un système de fermions sous l'effet d'un potentiel OH et d'un champ magnétique à température finie.

Une des tâches les plus difficiles était de résoudre analytiquement ce type de système et ceci, sans faire des approximations. Pour cela, les premiers travaux de Brack [99] ont été de construire la solution exacte d'un système de fermions plongés dans un potentiel d'OH de dimension D et à une température nulle, en utilisant la technique de la transformée de Laplace inverse de la matrice densité de Bloch (MDB).

Notre objectif était d'étudier analytiquement et numériquement un système de fermions piégés dans un potentiel d'OH à deux dimensions (2D), sous l'effet d'un champ magnétique à température nulle. En utilisant la même technique de calcul qu'en [107] de la MDB, nous allons calculer les expressions **exactes** de : la densité locale, sa transformée dans l'espace de Fourier (impulsion), et la densité de courant, en utilisant la matrice densité réduite à un corps, appelée dans la suite matrice densité d'ordre 1.

Ce chapitre est organisé comme suit. En première partie, nous allons déterminer quelques propriétés statiques d'un système de fermions sous l'effet d'un OH et d'un champ magnétique. Pour cela, nous allons introduire un outil théorique important dans notre analyse, qui est la matrice densité de Bloch (MDB), à partir de laquelle nous allons dériver les éléments de la matrice densité d'ordre 1, la densité de courant, et la densité de particules dans l'espace de Fourier.

En deuxième partie, des études numériques ont porté sur :

- La densité locale pour différentes intensités du champ magnétique.
- Une comparaison de la densité locale exacte pour un champ magnétique nul et pour différents nombres de particules, avec celle de l'approximation de Thomas Fermi (TF)
- L'allure de la densité dans l'espace de Fourier, avec et sans champ magnétique.

5.1 Le Hamiltonien du système

Soit un système de Fermions indépendants plongé dans un potentiel local, décrit par l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hat{H}\varphi_i(\vec{r}) = \left[\hat{T} + \hat{U}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \quad i = 1 \cdots N \quad (5.1)$$

où $\hat{U}(\vec{r})$ est le potentiel local à un corps qui sera spécifié plus tard, φ_i et ε_i sont les états et les énergies propres à une particule.

Si on considère que les N électrons sont piégés dans un potentiel d'OH à deux dimensions (2D) et isotrope de fréquence ω_h , le Hamiltonien (5.1) est dans ce cas,

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_h^2(x^2 + y^2). \quad (5.2)$$

En présence d'un champ magnétique uniforme $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$, dirigé suivant l'axe \vec{Oz} ($\vec{B}=(0,0,B)$), on modifie le Hamiltonien du système (5.2) qui devient,

$$\hat{H} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_h^2(x^2 + y^2). \quad (5.3)$$

où \vec{A} est le potentiel vecteur et $q = -e$ ($e > 0$) ($-e$ est la charge de l'électron), on a donc

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \wedge \vec{r}) = \frac{1}{2}(-yB\vec{i} + xB\vec{j}),$$

on peut écrire,

$$\vec{A} \cdot \vec{A} = \frac{1}{4}(x^2 + y^2)B^2, \quad \vec{A} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{B} \cdot \vec{L} = BL_z$$

où $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ est le moment orbital.

L'Hamiltonien (5.3) devient donc :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{1}{2}m\omega_h^2 + \frac{q^2 B^2}{8m} \right) (x^2 + y^2) - \frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L}$$

5.2 La matrice densité de Bloch

En termes de fréquence de Larmor ($\omega_L = |q|B/2m$), l'expression finale du Hamiltonien \hat{H} est,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2}m(\omega_h^2 + \omega_L^2)(x^2 + y^2) + i\hbar\omega_L \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (5.4)$$

On voit clairement que si le champ magnétique est nul ($\omega_L = 0$), on retrouve le Hamiltonien d'un OH à 2D (5.2).

Les énergies à une particule sont données par :

$$\varepsilon_{mn} = \hbar\Omega + m\hbar(\Omega - \omega_L) + n\hbar(\Omega + \omega_L).$$

où $\Omega = \sqrt{\omega_h^2 + \omega_L^2}$.

Pour calculer la matrice densité pour un nombre particules N quelconque, on pourrait utiliser les fonctions d'ondes. Ceci s'est avéré difficile si on veut obtenir une expression compacte.

Une autre méthode alternative et simple est basée sur la matrice densité de Bloch (MDB). Elle a été utilisée par les auteurs de [99], pour résoudre exactement pour ce type de systèmes sans la présence d'un champ magnétique. Dans le même cadre de la MDB, d'autres travaux ont été effectués [107, 108, 109] en ajoutant le champ magnétique au potentiel d'OH. Dans ce travail nous allons utiliser ce dernier type de méthode .

5.2 La matrice densité de Bloch

La matrice densité de Bloch est un outil théorique utile. Elle est définie par l'opérateur

$$\hat{C}_\beta = e^{-\beta\hat{H}}.$$

À température zéro et en représentation position, ses éléments de matrice s'écrivent

$$C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = \sum_i \varphi_i(\vec{r}) \varphi_i^*(\vec{r}') e^{-\beta\varepsilon_i}$$

où φ_i et ε_i sont l'état et l'énergie propres d'une particule, solutions de l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}\varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\vec{r}).$$

La constante β est une quantité mathématique auxiliaire, en général variable complexe et qui a la dimension d'une énergie inverse, donc la dimension de $1/(k_B T)$, mais qui pour autant n'a pas de signification thermodynamique a priori.

Cette matrice densité vérifie l'équation de Bloch,

$$\hat{H}C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = -\frac{\partial C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)}{\partial \beta}, \quad (5.5)$$

avec la condition initiale $\beta = 0$, $C_0(\vec{r}, \vec{r}'; 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$.

La solution de l'équation (5.5) avec un Hamiltonien (5.4) a été obtenue par March et Tosi [110], où la MDB prend la forme suivante (*cf.* équation (F.3))

$$C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = \frac{m\omega_L\omega_0}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} e^{\frac{-im\omega_L\omega_0}{\hbar}(xy'-yx')} \frac{\sinh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} \\ e^{-[(x'-x)^2+(y'-y)^2] \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} [\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) + \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}]} \\ e^{-[(x'+x)^2+(y'+y)^2] \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} [\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) - \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}]},$$

avec $\omega_0 = (1 + \omega_h^2/\omega_L^2)^{\frac{1}{2}}$.

En mettant $\Omega = \sqrt{\omega_h^2 + \omega_L^2} = \omega_L\omega_0$, et en faisant un scaling ici et dans tous ce qui suit pour les longueurs et les énergies par $\sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}$ et $\hbar\Omega$ respectivement, l'expression de la MDB devient en fonction des coordonnées du centre de masse $\vec{R} = (\vec{r} + \vec{r}')/2$ et relative $\vec{S} = \vec{r} - \vec{r}'$ (voir annexe F),

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-i(S_x R_y - R_x S_y) \frac{\sinh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)}} e^{-(\frac{S^2}{4} + R^2) \coth(\beta)} e^{(R^2 - \frac{S^2}{4}) \frac{\cosh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)}}, \quad (5.6)$$

où on pose $\omega = \omega_L/\Omega = \omega_0^{-1}$.

Le développement des exponentielles en utilisant les polynômes de Laguerre généralisés $L_k^d(x)$ (voir le calcul détaillé dans l'annexe F.1) donne l'expression simple, finale et **exacte** suivante (voir annexe F),

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n}(2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} e^{-[2k+1+n(1+\omega)+m(1-\omega)]\beta}, \quad (5.7)$$

où

$$A = \vec{R}^2 + \frac{\vec{S}^2}{4}, \quad D = \vec{R}^2 - \frac{\vec{S}^2}{4} - i(S_x R_y - R_x S_y).$$

À partir de l'équation (5.7) de la MDB, on peut dériver des grandeurs physiques comme la matrice densité d'ordre 1, en utilisant la transformée de Laplace inverse.

Il faut noter que l'expression de la MDB (5.7) est la même que celle obtenue par les auteurs de [108], qui est plus simple analytiquement que celle obtenue par ces mêmes auteurs auparavant dans la référence [107].

5.3 Calcul de la matrice densité

La quantité fondamentale à partir de laquelle les propriétés d'un gaz quantique de fermions sont dérivées, est la matrice densité du 1^{er} ordre $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$. Elle peut être obtenue par application de la transformée de Laplace inverse de la MDB,

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{2C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)}{\beta} \right], \quad (5.8)$$

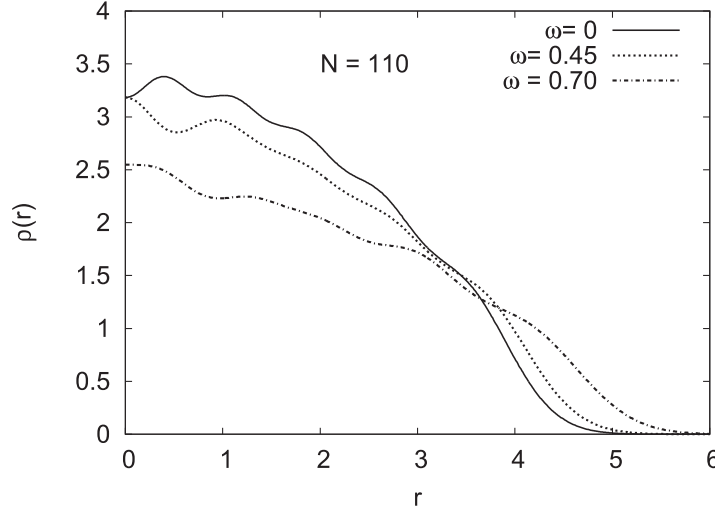


FIG. 5.1 – Densité spatiale de $N=110$ fermions pour différentes intensités du champ magnétique.

où λ est l'énergie de Fermi et le facteur 2 tient compte du spin.

Le résultat final obtenu pour la matrice densité est (voir annexe F)

$$\rho(\vec{R}, \vec{S}) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n} (2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} \Theta \left[\lambda - \{2k+1+n(1+\omega)+m(1-\omega)\} \right] \quad (5.9)$$

où $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside.

La densité locale qui représente la partie diagonale de la matrice densité du 1^{er} ordre, est obtenue pour $\vec{r} = \vec{r}' = \vec{R}$, donc

$$\rho(\vec{R}) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n} (2\vec{R}^2) e^{-R^2} \frac{\vec{R}^{2(m+n)}}{m!n!} \Theta \left[\lambda - \{2k+1+n(1+\omega)+m(1-\omega)\} \right] \quad (5.10)$$

L'étude numérique de la densité spatiale (5.10), pour un système composé de $N=110$ fermions plongé dans un potentiel d'OH à 2D, et un champ magnétique uniforme à température zéro, est présentée sur la figure 5.1 pour différentes intensités du champ magnétique.

À partir de la figure 5.1 on peut remarquer les points suivants :

- La présence des oscillations est le résultat d'effet de couches, dans les deux cas, avec et sans champ magnétique.
- Les oscillations sont fortement marquées dans le centre du système par rapport à la surface.
- Plus l'intensité du champ magnétique augmente, plus la courbe de la densité devient lisse et plus étalée.

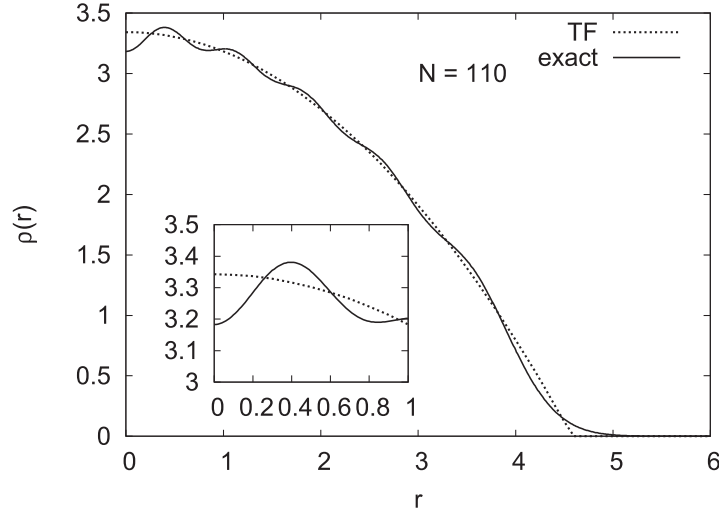


FIG. 5.2 – Densité spatiale exacte pour $N=110$ fermions comparée avec celle de TF.

La deuxième étape consiste à comparer numériquement, la densité locale obtenue ainsi avec celle de l'approximation de Thomas-Fermi (TF) [1]. Dans ce dernier cas, la densité donnée par [109] est

$$\rho_{\text{TF}}(\vec{r}) = \frac{1}{\pi} \left(\lambda_{\text{TF}} - \frac{1}{2}(1 - \omega^2)r^2 \right) \Theta \left(\lambda_{\text{TF}} - \frac{1}{2}(1 - \omega^2)r^2 \right).$$

où λ_{TF} est l'énergie de Fermi dans l'approximation TF.

Dans un premier temps, on va se limiter au cas d'un champ magnétique nul ($\omega = 0$) pour des systèmes qui contiennent différents nombre de particules N et qui remplissent entièrement $M+1$ couches. Dans ce cas, le nombre de particules pour une dimension D est tel que [108],

$$N(M) = 2 \binom{M+D}{M}$$

où $\binom{M+D}{M}$ est le coefficient binomial.

Pour un système à 2 dimensions, où $M+1$ couches sont pleines, le nombre de particules N est $N=M^2+3M+2$ (voir annexe F), et le niveau de Fermi λ correspond dans ce cas à $\lambda=M+1$.

Notre but dans cette partie est de comparer la densité locale exacte avec celle de TF. Les résultats obtenus pour différents nombres de particules $N=110$, 380 et 1260, qui occupent $M+1=10$, 19 et 35 couches sont présentés sur les figures 5.2, 5.3 et 5.4 respectivement.

Sur ces figures, on peut remarquer les points suivants :

- La présence d'oscillations dans la densité locale exacte, qui sont le résultat d'effets de couches, qui sont par la nature même, absente dans l'approche de TF.
- En variant le nombre de particules de $N=110$ à 1260, l'allure de la densité exacte devient de plus en plus proche de celle de TF (les courbes deviennent de plus en

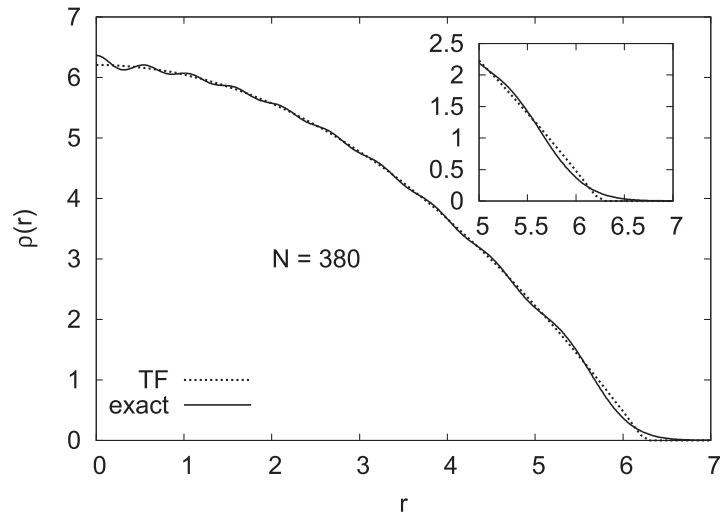


FIG. 5.3 – Densité spatiale exacte pour $N=380$ fermions comparée avec celle de TF.

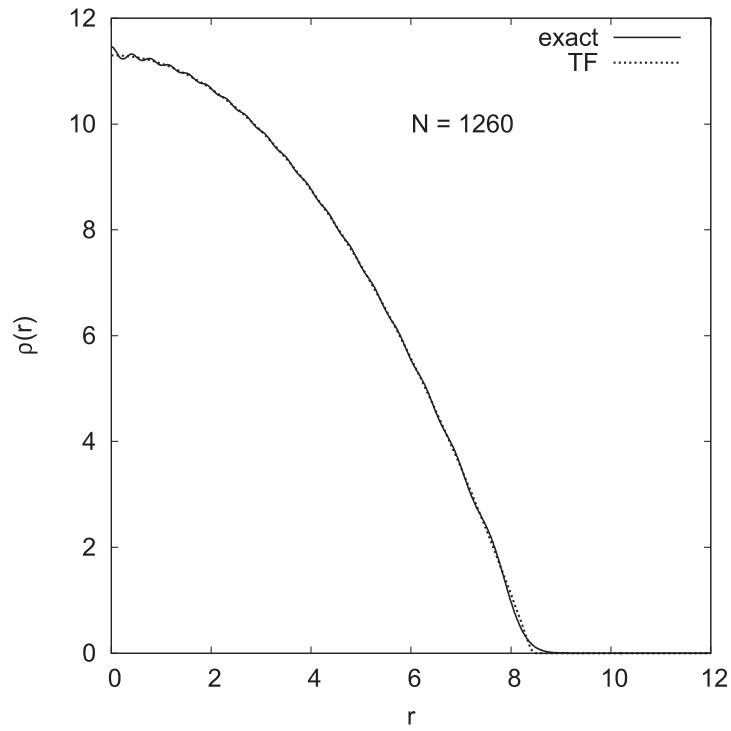


FIG. 5.4 – Densité spatiale exacte pour $N=1260$ fermions comparée avec celle de TF.

- plus lisses)
- les oscillations sont plus prononcées au centre qu'à la surface.
- au point tournant $r_0 = \sqrt{2\lambda}$, la densité de TF s'annule.

En résumé, pour des systèmes à petits nombres de particules, des oscillations sont présentes et fortement marquées dans la densité locale exacte. Cependant, en augmentant le nombre de particules, ces effets de couches diminuent, et l'allure de la densité s'approche de celle de TF. Donc la comparaison numérique de nos résultats avec celle de TF a retrouvé comme on s'y attendait, que cette dernière approximation est une excellente description de la matrice densité du 1^{er} ordre à la limite où N est très grand. À cette limite la densité locale exacte devient semblable à celle de TF, donc $\lim_{N \rightarrow \infty} \rho(\vec{r}) \longrightarrow \rho_{\text{TF}}(\vec{r})$. Ce point a été déjà remarqué notamment par les auteurs de la référence [97].

5.4 La densité dans l'espace de Fourier

Dans ce paragraphe, on va établir une expression analytique simple pour transformée de Fourier $n(\vec{k})$ de la densité de particules $\rho(\vec{r})$ pour le système physique décrit auparavant. Ceci a été motivé par les résultats obtenus récemment [101] pour le profil de densité $n(\vec{k})$ dans le cas d'un système de Fermions confinés par un oscillateur harmonique à d dimensions et en absence de champ magnétique.

La transformée de Fourier $n(\vec{k})$ est obtenue à partir de la densité locale $\rho(\vec{r})$ comme

$$n(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^d r. \quad (5.11)$$

Sa transformée inverse est telle que

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{+\infty} n(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^d k.$$

si N désigne le nombre total de particules du système, alors

$$n(0) = N$$

On note aussi que la densité au centre de la trap est

$$\rho(0) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{+\infty} n(\vec{k}) d^d k.$$

Il est important de ne pas confondre le profil de densité $n(\vec{k})$ avec la densité dans l'espace des moments.

Partant de la relation qui exprime la densité en fonction de la MDB

$$\rho(\vec{r}) = \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{2C(\vec{r}; \beta)}{\beta} \right],$$

5.4 La densité dans l'espace de Fourier

l'équation (5.11) de densité dans l'espace de Fourier devient dans le cas de 2 dimensions

$$n(\vec{k}) = 2\mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{C(\vec{r}; \beta)}{\beta} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^2r \right].$$

Cette quantité étant calculée en détail dans l'annexe F.4, nous reportons ici seulement le résultat final, qui est

$$n(\vec{k}) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} L_n\left(\frac{k^2}{4}\right) L_m\left(\frac{k^2}{4}\right) e^{-\frac{k^2}{4}} \Theta \left[\lambda - \{1 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)\} \right] \quad (5.12)$$

Vérifions que cette expression satisfait bien à l'équation $n(0) = N$.

En effet pour $\vec{k} = 0$ et sachant que $L_n(0) = 1$, on a bien

$$n(0) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \Theta \left[\lambda - \{1 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)\} \right] = N.$$

Vérifions qu'en absence de champ magnétique, c'est à dire $\omega = 0$, l'expression de $n(\vec{k})$ se réduit à celle obtenue dans la référence [101] pour le cas $d = 2$. On a donc

$$n(\vec{k}) = 2 e^{-\frac{k^2}{4}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} L_n\left(\frac{k^2}{4}\right) L_m\left(\frac{k^2}{4}\right) \Theta \left[\lambda - (1 + n + m) \right]$$

On pose $n + m = P$ et on désigne par M la valeur maximale de P . L'énergie de Fermi est $\lambda = P + 1$. On peut écrire :

$$n(\vec{k}) = 2 e^{-\frac{k^2}{4}} \sum_{P=0}^M \sum_{m=0}^P L_{P-m}\left(\frac{k^2}{4}\right) L_m\left(\frac{k^2}{4}\right)$$

Si on utilise la relation [102] $\sum_m^P L_{P-m}(x) L_m(y) = L_P^1(x+y)$, on déduit que

$$n(\vec{k}) = 2 e^{-\frac{k^2}{4}} \sum_{P=0}^M L_P^1\left(\frac{k^2}{2}\right)$$

Sachant que $\sum_{P=0}^M L_P^1(x) = L_M^2(x)$, on aboutit à

$$n(\vec{k}) = 2 e^{-\frac{k^2}{4}} L_M^2\left(\frac{k^2}{2}\right)$$

où L_P^1 et L_P^2 sont respectivement les polynômes de Laguerre généralisés d'ordre un et deux et de degré P . Ce dernier résultat est bien celui obtenu dans la référence [101] en tenant compte du spin (facteur 2) et du scaling pour les longueurs $\sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_h}}$ (B=0) mentionné dans la section 1.2, qui était utilisé dans tous nos calculs.

On peut remarquer que l'expression de la densité dans l'espace de Fourier (5.12) a une forme très simple par rapport à son expression dans la représentation coordonnées (5.10).

À notre connaissance le résultat donné dans l'équation (5.12) est nouveau, malgré sa forme analytique simple, il ne semble pas avoir été reporté auparavant.

Recemment *Vignolo et al* [103] ont proposé d'utiliser la diffusion de la lumière par un gaz d'atomes confinés, afin de sonder la distribution de la densité et de mettre en évidence la structure en couches dans cette dernière. Le faisceau de lumière tombant perpendiculairement au plan (x, y) du confinement du gaz est diffusé. La distribution angulaire de la lumière diffusée permet de composer en deux composantes : un terme élastique et un autre inélastique tenant compte des excitations du gaz quantique. Si la fréquence de la lumière utilisée est loin des fréquences de résonance du système, seul le terme élastique subsiste. Ce terme est déterminé par le facteur de structure $S_e(k_x, k_y)$

$$S_e(k_x, k_y) = \left| \int dx \int dy e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} \rho(x, y) \right|^2$$

où $\vec{k} = (k_x, k_y)$ est le vecteur d'onde de transfert.

On voit que ce facteur de structure est proportionnel à la transformée de Fourier de la densité $\rho(\vec{k})$ du système. Le résultat exacte que nous avons établi (où équation (5.12)) permet de calculer ce facteur de structure de façon exacte pour un nombre, en principe arbitraire, de particules.

Le résultat présenté dans l'équation (5.12), se généralise de façon évidente à température finie, il s'écrit :

$$n(\vec{k}) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} L_n\left(\frac{k^2}{4}\right) L_m\left(\frac{k^2}{4}\right) \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{n,m}-\mu}{T}} + 1}$$

où $\epsilon_{n,m} = \lambda - [1 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)]$ et μ est le potentiel chimique, obtenu par l'équation

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{n,m}-\mu}{T}} + 1}$$

ici on a pris la constante de Boltzmann $k_B = 1$ et on mesure la température en unité d'énergie.

le facteur de structure correspondant peut aussi être calculée exactement.

La densité spatiale calculée dans l'espace de Fourier (5.12) est présentée dans la figure 5.5. On s'est limité tout d'abord à un calcul pour un système de $N=240$ particules qui occupent $M+1=15$ couches, à 2D et sans champ magnétique, et ceci dans le but de retrouver avec nos résultats ceux obtenus récemment dans la référence [101], qui constituent un cas particulier de notre résultat où le champ magnétique est nul.

Considerons, comme deuxième étape, le cas d'un système de $N=110$ particules, en présence d'un champ magnétique. Dans ce cas, le niveau de Fermi λ est déterminé soit à partir de l'équation (F.17) entre le nombre de particules N et le niveau de Fermi λ , pour une intensité ω du champ magnétique,

$$N = \frac{\lambda^2 + \lambda(1 - \omega) + \omega - 2\omega^2}{1 - \omega^2}.$$

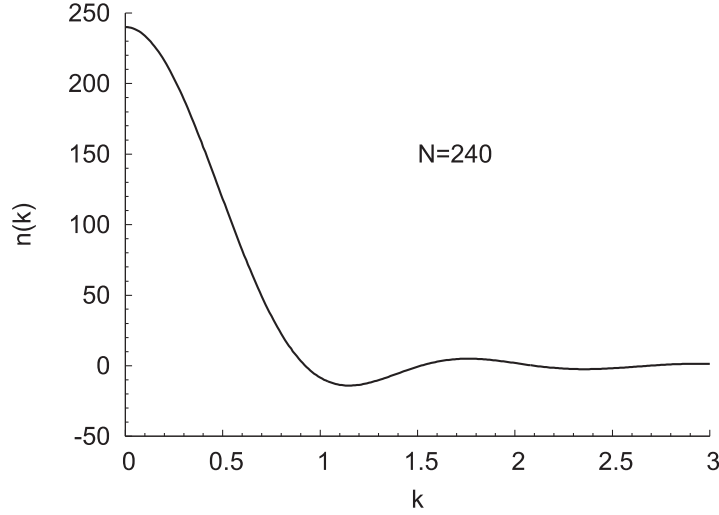


FIG. 5.5 – Profil de densité dans l'espace de Fourier pour $N=240$ particules, et sans champ magnétique ($\omega = 0$).

soit à travers la condition sur le nombre de particules $N=n(0)$.

La densité pour un tel système est présentée sur la figure 5.6 pour différentes intensités du champ magnétique $\omega = 0, 0.45$ et 0.70 . Les profils sont semblables avec des oscillations qui sont en phase.

De façon générale, on peut conclure que l'expression analytique de la densité dans l'espace de Fourier prend une forme très simple, pour un système de fermions, dans un potentiel d'OH à 2D avec un champ magnétique. Numériquement, elle oscille approximativement avec la même phase pour différentes intensités du champ magnétique.

5.5 La densité de courant

La présence d'un champ magnétique engendre un courant dans le système. Dans ce paragraphe, on se propose de calculer une expression exacte de la densité de courant $\vec{J}(\vec{r})$. Elle est définie à partir de la matrice densité par

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2im} \left(\vec{\nabla}_r - \vec{\nabla}_{r'} \right) \rho(\vec{r}, \vec{r}')|_{\vec{r}'=\vec{r}}.$$

où encore

$$\vec{J}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{2im} \vec{\nabla}_S \rho(\vec{R}, \vec{S})|_{\vec{S}=\vec{R}}.$$

À partir de l'équation (5.8) qui relie la matrice densité et la MDB par la transformée de Laplace inverse, la densité de courant devient

$$\vec{J}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{im} \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\vec{\nabla}_S \frac{C(\vec{R}, \vec{S}, \beta)}{\beta} \right]_{\vec{S}=\vec{R}}.$$

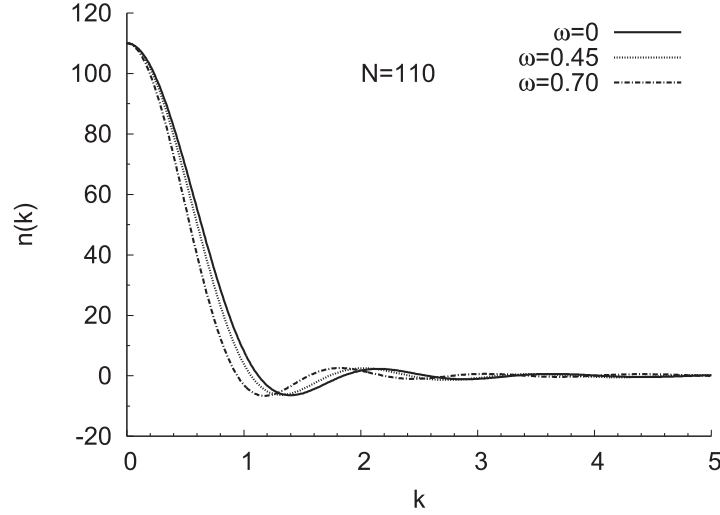


FIG. 5.6 – Le profil de densité dans l'espace de Fourier pour $N=110$ particules, et pour différentes intensités du champ magnétique $\omega = 0, 0.45, 0.70$.

Nous donnons ici le résultat final de la densité de courant et renvoyons le lecteur à l'annexe (F.3) pour les détails de calcul.

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{\pi m} (\vec{k} \wedge \vec{R}) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n+1} (2R^2) e^{-R^2} \frac{R^{2m}}{m!} \frac{R^{2n}}{n!} \\ \left(\Theta \left[\lambda - \{2k - \omega + 2 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)\} \right] \right. \\ \left. - \Theta \left[\lambda - \{2k + \omega + 2 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)\} \right] \right). \end{aligned} \quad (5.13)$$

On voit que le courant $\vec{J}(\vec{r})$ est azimutal quelque soit l'intensité du champ magnétique.

5.6 Conclusions

L'étude d'un gaz quantique a présenté ces dernières années, un grand intérêt sur les plans théorique et expérimental. Dans notre étude on s'est intéressé à un système de fermions sans interaction plongés dans un potentiel d'OH à 2D et sous l'effet d'un champ magnétique uniforme et à température nulle.

Les points importants de cette étude étaient d'examiner analytiquement et numériquement les expressions exactes des grandeurs physiques. Cependant, la quantité la plus fondamentale, à partir de laquelle diverses densités sont dérivées, est la matrice densité au 1^{er} ordre $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$. Sans aucun doute, le moyen théorique central pour calculer cette dernière, est la méthode simple utilisée par [99], à savoir la MDB, en prenant la transformée de Laplace inverse. À partir de cette méthode, une forme analytique simple de la matrice densité $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ a été dérivée, ainsi que la densité locale, la densité de courant et

5.6 Conclusions

la densité dans l'espace de Fourier $n(\vec{k})$. Ces grandeurs physiques ont été étudiées numériquement, pour mettre en évidence des oscillations marquées, dues aux effets de couches. Ces oscillations jouent un rôle de moins au moins grands quand on augmente le nombre de particules, où la densité locale devient proche de celle de TF.

Ces résultats sont d'une grande importance particulière, du point de vue théorique, où l'expression de la matrice densité exacte est utile dans la DFT (Density Functional Theory), et sa transformée de Fourier $n(\vec{k})$ joue un rôle important dans plusieurs applications physiques. Citons par exemple la théorie de diffusion élastique des électrons par les noyaux atomiques, où la densité dans l'espace de Fourier (5.12) est le facteur de diffusion $F(\vec{k}) = n(\vec{k})$. Ce dernier apparaît dans l'expression de la section efficace de diffusion élastique [101]

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_0 |F(\vec{k})|^2.$$

où $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_0$ est la section efficace différentielle au point 0.

Cette étude n'est qu'un point de départ, pour plusieurs autres études possibles :

- L'étude des corrélations dans un système de nucléons en rotation, où l'Hamiltonien a une forme similaire à celui du Hamiltonien donné par l'équation (5.4). Cet Hamiltonien sous contrainte est ce qu'on appelle le Routhian.
- Une étude similaire pour le cas d'un gaz en interaction, où les particules du système quantique interagissent faiblement, sans pour autant mettre en cause l'approche du champs moyen utilisée ici.
- Le calcul des quantités thermodynamiques : l'énergie cinétique, la matrice densité d'ordre 2, ...etc.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Les travaux effectués dans cette thèse sont partagés en deux parties. La première partie consiste en l'étude approfondie du traitement des corrélations au delà du champ moyen, précisément de type vibrationnel et d'appariement, dans le cadre de l'approximation HTDA avec conservation du nombre de particules et sans violation du principe de Pauli.

L'utilisation de l'approximation HTDA fournit un cadre idéal pour décrire simultanément les corrélations d'appariement et les corrélations vibrationnelles. Leur description nécessite l'utilisation d'une interaction résiduelle de type delta de courte portée, et multipole-multipole de longue portée. Dans notre cas nous nous sommes limités pour cette dernière au seul degré de liberté quadrupolaire.

La confection d'un code numérique a été une des phases les plus importantes dans le déroulement de cette thèse. Nous avons étendu le code initial HTDA qui traite les neutrons et les protons séparément, en vue d'obtenir un code qui traite également les corrélations d'appariement neutron-proton, et aussi les corrélations de type appariement et vibrationnelles simultanément. Nous nous sommes intéressés au noyau doublement magique ^{40}Ca , où nous avons décrit les propriétés de l'état fondamental et les états excités de corrélations vibrationnelles avec et sans appariement, en mettant en exergue le rôle important des corrélations neutron-proton. Une attention toute particulière a été portée aux propriétés de la RGQIS. Nous avons calculé les différents moments, les règles de somme, les énergies et les largeurs, avec les paramétrisations SkM* et SIII de l'interaction de Skyrme, pour décrire la partie champ moyen de notre approche.

Généralement, nos résultats pour les moments, les énergies et les largeurs se sont trouvés en bon accord avec les données expérimentales et les résultats d'autres approches théoriques. Ils ont mis en évidence la présence d'un pic bien prononcé résultat d'excitations de type $2\hbar\omega$. Les pourcentages obtenus pour les règles de somme sont généralement satisfaisants.

L'ajout de corrélations d'appariement aux corrélations vibrationnelles n'apparaît important que dans le cas où ces dernières sont faibles. Ceci est dû pour une grande part à la nature de notre noyau doublement magique. Il est évident que l'approche HTDA est surtout bien adaptée à la description des corrélations d'appariement en régime faible, où les approches HFB ou HF+BCS sont défaillants.

Nos développements théoriques et numériques ont donc permis d'aboutir à une utilisation de l'approche HTDA, qui permet de décrire raisonnablement tous type de corrélations appariement et vibrationnelles, dans le fondamental comme dans les états excités, avec deux types d'interactions delta et quadrupole-quadrupole. Ceci a permis d'étudier l'importance relative d'un type de corrélations par rapport à l'autre.

Des extensions de notre approche HTDA seront nécessaires, comme l'ajout des corrélations d'ordre multipolaire qui diffèrent de $\lambda = 2$ comme celles liées au degré de liberté octupolaire. L'amélioration du code de diagonalisation pour les grandes matrices indépendant du choix des paramètres (pivot et Nloop) sera une étape importante pour un calcul plus exact des états excités.

L'approche HTDA dans sa version actuelle, permettant le traitement des corrélations d'appariement et vibrationnelles tenant compte comme il se doit de l'interaction entre neutron-proton, s'avère très précieuse pour l'étude de la structure en couches des noyaux exotiques, sujet actuellement dominant pour beaucoup de théoriciens et expérimentateurs de physique nucléaire, avec l'avènement de sites expérimentaux tels que SPIRAL2. Une autre application de cette approche, concernant l'étude du mélange d'isospin est actuellement en cours de développement au CENBG [114, 115]. Ce mélange joue un rôle important dans le traitement de la désintégration β , des noyaux proches de la ligne de stabilité $N=Z$.

La seconde partie de cette thèse a porté sur une étude qui a soulevé ces dernières années un grand intérêt sur les plans théorique et expérimental, à savoir l'étude d'un gaz de fermions confinés dans un potentiel d'oscillateur harmonique à 2D, à température nulle, et en présence d'un champ magnétique uniforme.

Des expressions exactes des grandeurs thermodynamiques telles que : la densité locale, sa transformée dans l'espace de Fourier, et la matrice densité de courant, ont été dérivées en utilisant l'outil important que constitue la transformée inverse de Laplace de la matrice densité de Bloch. Nos résultats sont analogues à ceux obtenus récemment par le groupe de M. Brack.

Cette dernière étude semble ouvrir des perspectives prometteuses soit en DFT ou en théorie de la diffusion. Elle pourra également être étendue en physique nucléaire à l'étude des corrélations dans un système de nucléons en rotation, en utilisant l'analogie bien connue entre vitesse angulaire de rotation globale et champ magnétique.

ANNEXES

Annexe A

La seconde quantification et Théorème de Wick

Cet annexe s'inspire fortement de la référence [25].

A.1 Les opérateurs de création et d'annihilation

On appelle l'espace de Fock, l'ensemble constitué des états avec un nombre arbitraire de particules, ainsi que d'un état de vide $|0\rangle$, qui ne contient aucune particule. En seconde quantification on définit des opérateurs de création \hat{a}_α^\dagger et d'annihilation \hat{a}_α d'une particule dans un état à une particule α par :

$$\hat{a}_\alpha^\dagger |0\rangle = |\alpha\rangle$$

et

$$\hat{a}_\alpha |\alpha\rangle = |0\rangle.$$

Les états à plusieurs particules sont obtenus par application successive d'opérateurs de création, par exemple :

$$\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \cdots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle = |\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle.$$

A.2 Relations d'anticommutation

Les états d'un système de N fermions sont construit à partir du vide, en appliquant N opérateurs de création. Cet état de l'espace de Fock, correspond à une fonction d'onde dans l'espace des coordonnées qui possède la bonne symétrie, dans la permutation entre deux particules, c'est à dire qu'il correspond à un déterminant de Slater. Puisqu'un déterminant de Slater est antisymétrique dans la permutation de deux lignes quelconque i et j , nous devons avoir le même comportement pour l'état à N particules dans l'espace de Fock, tel que

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \cdots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle &= |\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle \\ &= -|\alpha_2 \alpha_1 \alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle \\ &= -\hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \cdots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle. \end{aligned}$$

On en conclut que

$$\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger = -\hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger,$$

ou encore :

$$\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger + \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger = \{\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger, \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger\} = 0.$$

Plus généralement, on peut montrer que les opérateurs de création $\hat{a}_{\alpha_i}^\dagger$ et d'annihilation \hat{a}_{α_j} satisfont aux relations d'anticommutation suivantes :

$$\{\hat{a}_{\alpha_i}^\dagger, \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{a}_{\alpha_i}, \hat{a}_{\alpha_j}\} = 0, \quad \{\hat{a}_{\alpha_i}, \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger\} = \delta_{\alpha_i \alpha_j}.$$

A.3 Opérateur nombre de particules

À partir des opérateurs \hat{a}_β^\dagger et \hat{a}_β , on construit l'opérateur nombre de particules $\hat{N}_\beta = \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\beta$ tel que

$$\hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\beta |\hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2} \hat{a}_{\alpha_3} \dots \hat{a}_{\alpha_N}\rangle = \begin{cases} |\hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2} \hat{a}_{\alpha_3} \dots \hat{a}_{\alpha_N}\rangle, & \text{si } \beta \in \{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \dots \alpha_N\} \\ 0, & \text{si } \beta \notin \{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \dots \alpha_N\} \end{cases}$$

Il en résulte qu'on peut définir un opérateur nombre de particules

$$\hat{N} = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_k \hat{N}_k,$$

où la sommation porte sur tous les états $|\alpha_k\rangle$.

Les opérateurs nombre de particules satisfont à la relation $\hat{N}_\beta^2 = \hat{N}_\beta$. Il en résulte que leurs valeurs propres sont 0 ou 1. Ceci est à nouveau une manifestation du principe de Pauli qui entraîne que le nombre de particules dans un état $|\beta\rangle$ ne peut être que 0 ou 1.

A.4 Opérateur à un et deux corps

Considérons des opérateurs agissant sur un système de N particules, et qui s'écrivent comme des sommes de termes ne faisant intervenir que les variables dynamiques d'une particule, ou de deux particule tel que

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}^{(1)} &= \sum_{i=1}^N \hat{\theta}_i \\ \hat{\Theta}^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{\theta}_{ij} \end{aligned}$$

où les sommations portent sur tous les états à une particule.

On appellera ces opérateurs respectivement, des opérateurs à 1 et 2 corps.

En seconde quantification, ces opérateurs prennent la forme suivante,

$$\hat{\Theta}^{(1)} = \sum_{ij} \langle i | \hat{\theta} | j \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \quad (\text{A.1})$$

et

$$\hat{\Theta}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{\theta} | \tilde{k}l \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \quad (\text{A.2})$$

A.5 Produits normaux, Contractions et Théorème de Wick

On appelle produit normal de $2q$ opérateurs (pair) notés $\hat{c}_1, \hat{c}_2, \dots, \hat{c}_{2q}$, qui sont indifféremment des opérateurs de création \hat{a}_i^\dagger ou d'annihilation \hat{a}_j de particules, noté par,

$$: \hat{c}_1 \hat{c}_2 \dots \hat{c}_{2q} :$$

c'est de placer les opérateurs de création de particules à gauche et les opérateurs d'annihilation de particules à droite, en conservant l'ordre respectif, en multipliant par une phase égale à la parité de permutation des opérateurs, par exemple

$$: \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4^\dagger := -\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_3.$$

Compte tenu de la définition du produit normal, la valeur moyenne pour l'état du vide de particules $|0\rangle$ de tout produit normal est nulle.

On définit la contraction de deux opérateurs \hat{c}_1 et \hat{c}_2 que l'on notera $\underline{\hat{c}_1 \hat{c}_2}$, comme la différence entre le produit classique et le produit normal des deux opérateurs, soit

$$\underline{\hat{c}_1 \hat{c}_2} = \hat{c}_1 \hat{c}_2 - : \hat{c}_1 \hat{c}_2 : \quad (\text{A.3})$$

Il résulte des définitions ci-dessus et des propriétés d'anticommutation des opérateurs de fermions que

$$\underline{\hat{a}_i \hat{a}_j} = \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger} = \underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} = 0$$

et

$$\underline{\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger} = \delta_{ij}$$

On peut généraliser l'équation (A.3) dans le cas de plus de deux opérateurs par un théorème, appelé théorème de Wick.

Le théorème de Wick dans sa forme faible, concerne la valeur moyenne d'un produit de $2q$ opérateurs sur l'état du vide de particules $|0\rangle$. Compte tenu de la propriété de nullité de tout produit normal sur cet état, cette valeur moyenne sera égale à la somme de tous les termes obtenus en effectuant le produit des contractions de deux opérateurs quelconques avec les contractions de deux opérateurs quelconques parmi les $2(q-1)$ opérateurs restants multiplié par les contractions de deux opérateurs quelconques parmi les $2(q-2)$ opérateurs restants, ... multiplié par la contraction des deux derniers opérateurs restants ainsi qu'une phase. Cette phase est égale à la parité de la permutation qui fait passer de l'ordre initial des opérateurs à celui obtenu dans l'écriture des produits de contraction de chaque terme.

A.6 Quasi-contractions et généralisation du théorème de Wick faible

La quasi-contraction est une extension de la notion de contraction, comme étant la valeur moyenne d'un produit de deux opérateurs de quasi-particules ($\hat{d}_i \hat{d}_j$) sur le vide $|0\rangle$, ce serait aussi la valeur moyenne du produit de deux opérateurs de particules ($\hat{c}_i \hat{c}_j$) sur un quasi-vide $|\tilde{0}\rangle$, on a alors les contractions

$$\underline{\underline{\hat{c}_i \hat{c}_j}} = \langle \tilde{0} | \hat{c}_i \hat{c}_j | \tilde{0} \rangle, \quad \underline{\underline{\hat{d}_i \hat{d}_j}} = \langle 0 | \hat{d}_i \hat{d}_j | 0 \rangle$$

On peut montrer que pour toute transformation de Bogoliubov, la valeur moyenne d'un produit d'un nombre pair d'opérateurs de quasi-particules sur le vide de particules, ou celle d'un produit d'un nombre pair d'opérateurs de particules sur le quasi-vide est donnée formellement par le même théorème de Wick faible. Dans la mesure où l'on remplace les contractions d'opérateurs par les quasi-contractions correspondantes.

Les calculs des éléments de matrice dans le formalisme HTDA sont facilités par l'utilisation d'une transformation de quasi-particule. Elle est définie à partir d'un déterminant de Slater de référence $|\Phi\rangle$ par

$$\hat{b}_i^\dagger = \begin{cases} \hat{a}_i & \text{si } |i\rangle \in |\Phi\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger & \text{si } |i\rangle \notin |\Phi\rangle. \end{cases}$$

Il est aisé de voir que $|\Phi\rangle$ est le quasi-vide associé à cette transformation.

À l'aide de la généralisation du théorème de Wick faible, on montre

$$\underline{\underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger}} = \underline{\underline{\hat{a}_i \hat{a}_j}} = 0, \quad \underline{\underline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j}} = \delta_{ij}^t, \quad \underline{\underline{\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger}} = \delta_{ij}^p.$$

où les notations δ_{ij}^t ou δ_{ij}^p signifient que les états i et j sont identiques et sont des états de trous, ou de particules respectivement.

Annexe B

La B.O.H.S.A

B.1 La troncation de la B.O.H.S.A

Les états individuels de HF sont développés sur une base d'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A), des fonctions propres d'Hamiltonien à un corps d'oscillateur harmonique,

$$\hat{H}_{\text{OH}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m(\omega_{\perp}^2 r^2 + \omega_z^2 z^2).$$

Un état de cette base s'écrit

$$|n_z, n_{\perp}, \lambda, \Sigma\rangle \equiv |n_z, \alpha, \beta, \Sigma\rangle = (-1)^{\beta} \frac{(a_z^{\dagger})^{n_z} (b_{\alpha}^{\dagger})^{\alpha} (b_{\beta}^{\dagger})^{\beta}}{\sqrt{n_z!} \sqrt{\alpha!} \sqrt{\beta!}} |000\rangle |\Sigma\rangle,$$

où les nombres quantiques,

n_z : nombre de quanta suivant (oz)

n_{\perp} : nombre de quanta suivant (ox) et (oy)

λ : nombre quantique correspondant à L_z

Σ : nombre quantique correspondant à S_z ,

avec

$$\alpha = \frac{n_{\perp} + \lambda}{2}, \quad \beta = \frac{n_{\perp} - \lambda}{2},$$

et les opérateurs $a_i^{\dagger}, b_i^{\dagger}$ sont des opérateurs de création bosonique (*cf.* section E.2).

En utilisant les variables sans dimensions appelées les coordonnées étirées

$$\zeta = z c_z, \quad \eta = (x^2 + y^2) c_{\perp}^2 = \rho^2 c_{\perp}^2,$$

on obtient $r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = \frac{\eta}{c_{\perp}^2} + \frac{\zeta^2}{c_z^2}$, avec

$$c_z = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}, \quad c_{\perp} = \sqrt{\frac{m\omega_{\perp}}{\hbar}}.$$

Une telle base est caractérisée par un couple de paramètre (b, q) équivalents aux fréquences d'oscillateur ω_{\perp} et ω_z

$$b = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} = (c_{\perp}^2 c_z)^{1/3} = \frac{C_{\perp}}{q^{1/6}}, \quad q = \frac{\omega_{\perp}}{\omega_z} = \frac{c_{\perp}^2}{c_z^2},$$

où $\omega_0^3 = \omega_\perp^2 \omega_z$, b est un paramètre qui fixe la longueur caractéristique, et q est un paramètre de déformation ($q = 1$: sphérique, $q > 1$: prolata, $q < 1$: oblate).

L'utilisation d'une base complète est impossible. Pour cela, une troncation est nécessaire. La prescription de troncation de la base consiste à inclure tous les états dont l'énergie d'oscillateur est inférieure à une certaine valeur

$$\hbar\omega_\perp(n_\perp + 1) + \hbar\omega_z(n_z + \frac{1}{2}) \leq \hbar\omega_0(N + 2), \quad (\text{B.1})$$

où N est le paramètre qui fixe la taille de la base, et correspond dans le cas sphérique, au nombre de couches d'oscillateur incluses dans la base.

Annexe C

Les éléments de matrice de l'interaction delta

C.1 La décomposition des états HF sur la B.O.H.S.A

Les états individuels $|\phi_i\rangle$ de HF sont développés sur une base d'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A) (cf. section 1.5) de spin $\Sigma = |+\rangle = \frac{1}{2}$ et de spin $\Sigma = |-\rangle = -\frac{1}{2}$ de telle sorte

$$|\phi_i\rangle = \sum_m^+ \chi_m |n_{z_m}, n_{\perp_m}, \lambda^+, +\rangle + \sum_m^- \chi_m |n_{z_m}, n_{\perp_m}, \lambda^-, -\rangle,$$

Dans le cas des noyaux paires-pairs avec symétrie axiale (ici $\vec{O}z$). Dans ce cas la troisième composante du moment angulaire total j_z est un bon nombre quantique. Notons K la valeur propre de j_z . Puisque $j_z = l_z + s_z$, dans ce cas $K = \lambda^\pm \pm \frac{1}{2}$.

À cause de l'invariance par renversement du sens du temps, on se limite aux valeurs de K positives. Par conséquent, seules les valeurs positives de λ^\pm intervenant dans les calculs HF.

La fonction d'onde individuelle ϕ_i peut se décomposer sous la forme,

$$\phi_i = \phi_i^+ |+\rangle + \phi_i^- |-\rangle. \quad (\text{C.1})$$

Le fait que λ^+ et λ^- sont positifs, l'équation (C.1) devient

$$\phi_i = e^{i\lambda^+ \phi} f_i^+ |+\rangle + e^{i\lambda^- \phi} f_i^- |-\rangle \quad (\text{C.2})$$

dont les parties spatiales sont

$$\begin{aligned} \phi_i^+(\vec{r}) &= (-1)^{\frac{\lambda^+ - |\lambda^+|}{2}} e^{i\lambda^+ \phi} f_i^+(\rho, z) \\ \phi_i^-(\vec{r}) &= (-1)^{\frac{\lambda^- - |\lambda^-|}{2}} e^{i\lambda^- \phi} f_i^-(\rho, z), \end{aligned}$$

où les fonctions f_i^+ et f_i^- dépendent en valeur absolue de λ^+ et λ^- respectivement, et s'expriment à l'aide des polynômes de Hermite et Laguerre généralisés,

$$f_i^\pm(\rho, z) \propto c_\perp \sqrt{c_z} e^{-(\zeta^2 + \eta)/2} \eta^{\frac{|\lambda^\pm|}{2}} H_{n_z}(\zeta) L_{n_r}^{|\lambda^\pm|}(\eta)$$

où $n_r = (n_\perp - |\lambda^\pm|)/2$.

Généralement, l'interaction delta est définie dans les deux canaux telle que,

$$\begin{aligned} S=0 \quad T=1, \quad \hat{V}_\delta &= \frac{1}{4} V_0^{T=1} (\mathbb{1} - \hat{P}^\sigma)(\mathbb{1} + \hat{P}^\tau) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ S=1 \quad T=0, \quad \hat{V}_\delta &= \frac{1}{4} V_0^{T=0} (\mathbb{1} + \hat{P}^\sigma)(\mathbb{1} - \hat{P}^\tau) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \end{aligned}$$

Les éléments de matrice d'interaction entre les états à N particules, conduit aux calculs de ces éléments entre les états individuels de HF. Puisque l'interaction delta est paire par l'échange des coordonnées espace, nous allons calculer les éléments de matrice de cette interaction pour les deux cas possibles pour assurer l'antisymétrisation de la fonction d'onde totale (principe de pauli généralisé).

C.2 Le canal S=0, T=1

C'est le cas d'interaction entre deux particules identiques (n-n, $T_z = -1$) (p-p, $T_z = +1$) et deux particules non identiques (n-p, $T_z = 0$).

En tenant compte de la décomposition des états individuels sur la base (B.O.H.S.A) (cf. équation (C.2)), nous allons calculer dans un premier temps les éléments de matrice d'interaction entre deux particules identiques :

particules identiques

$$\begin{aligned} \langle ab|\hat{v}_\delta|\widetilde{cd}\rangle &= \frac{V_0^\tau}{4} \langle ab|(\mathbb{1} - \hat{P}^\sigma)(\mathbb{1} + \hat{P}^\tau)(\mathbb{1} - \hat{P}^M \hat{P}^\sigma \hat{P}^\tau) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|cd\rangle \\ &= V_0^\tau \langle ab|(\mathbb{1} - \hat{P}^\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|cd\rangle \\ &= V_0^\tau \left[\langle \phi_a^+ \phi_b^- | \delta(\vec{r}_{12}) | \phi_c^+ \phi_d^- \rangle + \langle \phi_a^- \phi_b^+ | \delta(\vec{r}_{12}) | \phi_c^- \phi_d^+ \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle \phi_a^+ \phi_b^- | \delta(\vec{r}_{12}) | \phi_c^- \phi_d^+ \rangle - \langle \phi_a^- \phi_b^+ | \delta(\vec{r}_{12}) | \phi_c^+ \phi_d^- \rangle \right] \\ &= V_0^\tau \int \left[e^{i(-\lambda_a^+ - \lambda_b^- + \lambda_c^+ + \lambda_d^-)\varphi} f_a^+ f_b^- f_c^+ f_d^- + e^{i(-\lambda_a^- - \lambda_b^+ + \lambda_c^- + \lambda_d^+)\varphi} f_a^- f_b^+ f_c^- f_d^+ \right. \\ &\quad \left. - e^{i(-\lambda_a^+ - \lambda_b^- + \lambda_c^- + \lambda_d^+)\varphi} f_a^+ f_b^- f_c^- f_d^+ - e^{i(-\lambda_a^- - \lambda_b^+ + \lambda_c^+ + \lambda_d^-)\varphi} f_a^- f_b^+ f_c^+ f_d^- \right] d^3r \\ &= V_0^\tau \int_0^{2\pi} e^{i(-K_a - K_b + K_c + K_d)\varphi} d\varphi \int (f_a^+ f_b^- - f_a^- f_b^+) (f_c^+ f_d^- - f_c^- f_d^+) \rho d\rho dz \\ &= \frac{\pi V_0^\tau}{c_z c_\perp^2} \delta_{K_a + K_b, K_c + K_d} \int (f_a^+ f_b^- - f_a^- f_b^+) (f_c^+ f_d^- - f_c^- f_d^+) d\eta d\zeta. \end{aligned}$$

particules non identiques

En suivant la même procédure précédente, et en tenant compte que le terme antisymétrique de l'interaction est nul, nous obtenons,

$$\begin{aligned}\langle ab|\hat{v}_\delta|\widetilde{cd}\rangle &= \frac{V_0^\tau}{4}\langle ab|(\mathbb{1} - \hat{P}^\sigma)(1 + \hat{P}^\tau)(\mathbb{1} - \hat{P}^M \hat{P}^\sigma \hat{P}^\tau)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|cd\rangle \\ &= V_0^\tau\langle ab|(\mathbb{1} - \hat{P}^\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|cd\rangle \\ &= \frac{\pi V_0^\tau}{2c_z c_\perp^2}\delta_{K_a+K_b, K_c+K_d}\int (f_a^+ f_b^- - f_a^- f_b^+)(f_c^+ f_d^- - f_c^- f_d^+)\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta.\end{aligned}$$

C.3 Le canal S=1, T=0

Le seul cas possible est l'interaction entre deux particules non identiques (neutron-proton). En suivant la même procédure que dans le calcul précédant, les éléments de la matrice d'interaction delta dans le canal S=1, T=0 sont tels que,

$$\begin{aligned}\langle ab|\hat{v}_\delta|\widetilde{cd}\rangle &= \frac{V_0^\tau}{4}\langle ab|(1 + \hat{P}^\sigma)(\mathbb{1} - \hat{P}^\tau)(\mathbb{1} - \hat{P}^M \hat{P}^\sigma \hat{P}^\tau)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|cd\rangle \\ &= \frac{V_0^\tau}{2}\langle ab|(\mathbb{1} + \hat{P}^\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|cd\rangle \\ &= \frac{V_0^\tau}{2}\left[\langle\phi_a^+\phi_b^-|\delta(\vec{r}_{12})|\phi_c^+\phi_d^-\rangle + \langle\phi_a^-\phi_b^+|\delta(\vec{r}_{12})|\phi_c^-\phi_d^+\rangle\right. \\ &\quad + \langle\phi_a^+\phi_b^-|\delta(\vec{r}_{12})|\phi_c^-\phi_d^+\rangle + \langle\phi_a^-\phi_b^+|\delta(\vec{r}_{12})|\phi_c^+\phi_d^-\rangle \\ &\quad \left.+ 2\langle\phi_a^+\phi_b^+|\delta(\vec{r}_{12})|\phi_c^+\phi_d^+\rangle + 2\langle\phi_a^-\phi_b^-\delta(\vec{r}_{12})|\phi_c^-\phi_d^-\rangle\right] \\ &= \frac{V_0^\tau}{2}\int\left[e^{i(-\lambda_a^+-\lambda_b^-+\lambda_c^++\lambda_d^-)\varphi}f_a^+f_b^-f_c^+f_d^- + e^{i(-\lambda_a^--\lambda_b^++\lambda_c^-+\lambda_d^+)\varphi}f_a^-f_b^+f_c^-f_d^+ \right. \\ &\quad + e^{i(-\lambda_a^+-\lambda_b^-+\lambda_c^-+\lambda_d^+)\varphi}f_a^+f_b^-f_c^-f_d^+ + e^{i(-\lambda_a^--\lambda_b^++\lambda_c^++\lambda_d^-)\varphi}f_a^-f_b^+f_c^+f_d^- \\ &\quad \left.+ 2e^{i(-\lambda_a^+-\lambda_b^++\lambda_c^++\lambda_d^+)\varphi}f_a^+f_b^+f_c^+f_d^+ + 2e^{i(-\lambda_a^--\lambda_b^-+\lambda_c^-+\lambda_d^-)\varphi}f_a^-f_b^-f_c^-f_d^-\right]\mathrm{d}^3r \\ &= \frac{V_0^\tau}{2}\int_0^{2\pi}e^{i(-K_a-K_b+K_c+K_d)\varphi}\mathrm{d}\varphi\int\left[(f_a^+f_b^- + f_a^-f_b^+)(f_c^+f_d^- + f_c^-f_d^+) \right. \\ &\quad \left.+ 2(f_a^+f_b^+f_c^+f_d^+ + f_a^-f_b^-f_c^-f_d^-)\right]\rho\mathrm{d}\rho\mathrm{d}z \\ &= \frac{\pi V_0^\tau}{2c_z c_\perp^2}\delta_{K_a+K_b, K_c+K_d}\int\left[(f_a^+f_b^- + f_a^-f_b^+)(f_c^+f_d^- + f_c^-f_d^+) \right. \\ &\quad \left.+ 2(f_a^+f_b^+f_c^+f_d^+ + f_a^-f_b^-f_c^-f_d^-)\right]\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta.\end{aligned}$$

Annexe D

La calcul détaillé des éléments de la matrice de l'interaction V_{res}

D.1 Sans corrélations neutron-proton

Comme il était déjà mentionné au chapitre 2, le terme de l'interaction résiduelle (2.16) est donné par,

$$\hat{V}_{\text{res}} = \hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle, \quad (\text{D.1})$$

et contient un opérateur à un corps \hat{U}_{HF} et un opérateur à deux corps \hat{V} , qui sont respectivement donnés en seconde quantification (*cf.* annexe A), comme suit,

$$\hat{U}_{\text{HF}} = \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l.$$

$$\hat{V} = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k$$

Dans ce qui suit, nous allons calculer les éléments de matrice de l'interaction \hat{V}_{res} entre les états $|\Phi_\alpha\rangle$ et $|\Phi_\beta\rangle$,

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\beta \rangle = \langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\beta \rangle - \langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\beta \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle \delta_{\alpha\beta},$$

en utilisant le théorème de Wick faible (*cf.* annexe B).

D.1.1 entre deux états identiques

$$\begin{aligned}
 |\Phi_\alpha\rangle &= |\Phi_\beta\rangle \\
 \bullet \langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\alpha \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle \langle \Phi_\alpha | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k | \Phi_\alpha \rangle \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle \left[\delta_{ik}^{T(\Phi_\alpha)} \delta_{jl}^{T(\Phi_\alpha)} - \delta_{il}^{T(\Phi_\alpha)} \delta_{jk}^{T(\Phi_\alpha)} \right] \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{kl}^{T(\Phi_\alpha)} \left[\langle kl | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle - \langle lk | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle \right] \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{kl}^{T(\Phi_\alpha)} \langle kl | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle.
 \end{aligned}$$

Dans la somme $\sum_{kl}^{T(\Phi_\alpha)}$ la sommation porte sur tous les états occupés du quasi-vide $|\Phi_\alpha\rangle$ ($T(\Phi_\alpha)$), qui se décomposent en sommation sur les états occupés du vide $|\Phi_0\rangle$ (t_{HF}), en lui ajoutant tous les états de particules (p) de $|\Phi_\alpha\rangle$ par rapport au vide, et en retranchant tous les états de trous (t) de $|\Phi_\alpha\rangle$ par rapport au vide, donc

$$\sum_{kl}^{T(\Phi_\alpha)} = \sum_{kl}^{t_{HF}} + \sum_{kl}^p - \sum_{kl}^t \quad (\text{D.2})$$

on obtient finalement,

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\alpha \rangle = \frac{1}{2} \left[\sum_k^{t_{HF}} \sum_l^{t_{HF}} + 2 \sum_k^{t_{HF}} \sum_l^p - 2 \sum_k^{t_{HF}} \sum_l^t - 2 \sum_k^p \sum_l^t + \sum_k^p \sum_l^p + \sum_k^t \sum_l^t \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle. \quad (\text{D.3})$$

Pour un opérateur à un corps, on procède de la même façon

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\alpha \rangle &= \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \langle \Phi_\alpha | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l | \Phi_\alpha \rangle \\
 &= \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \delta_{kl}^{T(\Phi_\alpha)} \\
 &= \sum_k^{T(\Phi_\alpha)} \langle k | \hat{u} | k \rangle.
 \end{aligned}$$

Dans le cas d'un potentiel de HF, et en utilisant l'équation (1.11) dans la base canonique, nous obtenons

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\alpha \rangle = \sum_k^{T(\Phi_\alpha)} \sum_l^{t_{HF}} \langle kl | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle.$$

En remplaçant par la sommation définit dans l'équation (D.2)

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\alpha \rangle = \left(\sum_k^{t_{HF}} \sum_l^{t_{HF}} + \sum_k^p \sum_l^{t_{HF}} - \sum_k^t \sum_l^{t_{HF}} \right) \langle kl | \hat{v} | \tilde{k} \tilde{l} \rangle. \quad (\text{D.4})$$

en retranchant (D.4) de (D.3) on trouve,

$$\begin{aligned}\langle \Phi_\alpha | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\alpha \rangle &= \frac{1}{2} \left[\sum_k^t \sum_l^t + \sum_k^p \sum_l^p - 2 \sum_k^t \sum_l^p \right] \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{kl}^{t_{\text{HF}}} \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle \delta_{ii} \\ &= \left[\sum_{k < l}^t + \sum_{k < l}^p - \sum_k^t \sum_l^p \right] \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{kl}^{t_{\text{HF}}} \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle.\end{aligned}$$

Et puisque,

$$\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k,l}^{t_{\text{HF}}} \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle.$$

Dans ce cas les éléments diagonaux de la matrice d'interaction résiduelle sont,

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\alpha \rangle = \left[\sum_{k < l}^t + \sum_{k < l}^p - \sum_k^t \sum_l^p \right] \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle. \quad (\text{D.5})$$

D.1.2 entre deux états qui diffèrent par une particule

Puisque la plupart des déterminants de Slater sont résultats des excitations de type particules-trous, dans ce cas l'écriture des ces derniers est définie toujours à une phase près, le fait d'appliquer le théorème de Wick généraliser.

Si deux états diffèrent par une particule, dans ce cas $|\Phi_\beta\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_\alpha\rangle$

$$\begin{aligned}\bullet \langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\beta \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle \langle \Phi_\alpha | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_\alpha \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle \left[-\delta_{il}^T \delta_{k\alpha}^P \delta_{ja}^T + \delta_{ik}^T \delta_{l\alpha}^P \delta_{ja}^T + \delta_{ia}^{T(\Phi_\alpha)} (\delta_{jl}^T \delta_{k\alpha}^P - \delta_{jk}^T \delta_{l\alpha}^P) \right] \\ &= \sum_k^T \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle.\end{aligned}$$

En remplaçant la sommation par l'équation (D.2),

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\beta \rangle = \left(\sum_k^{t_{\text{HF}}} + \sum_k^p - \sum_k^t \right) \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle. \quad (\text{D.6})$$

Pour le potentiel de Hartree-Fock on obtient

$$\begin{aligned}\bullet \langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\beta \rangle &= \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \langle \Phi_\alpha | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_\alpha \rangle \\ &= \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \delta_{l\alpha}^P \delta_{ka}^T \\ &= \langle a | \hat{u} | \alpha \rangle.\end{aligned}$$

Donc

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\beta \rangle = \sum_k^{t_{\text{HF}}} \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle. \quad (\text{D.7})$$

de (D.6) et (D.7) on obtient

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\beta \rangle = \left(\sum_k^p - \sum_k^t \right) \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle. \quad (\text{D.8})$$

D.1.3 entre deux états qui diffèrent par deux particules

$$\begin{aligned} |\Phi_\beta\rangle &= \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b |\Phi_\alpha\rangle \\ \bullet \langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\beta \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle \langle \Phi_\alpha | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b | \Phi_\alpha \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle \left[-\delta_{ia}^T \delta_{jb}^T (\delta_{k\alpha}^P \delta_{l\beta}^P - \delta_{l\alpha}^P \delta_{k\beta}^P) + \delta_{ib}^T \delta_{ja}^T (\delta_{k\alpha}^P \delta_{l\beta}^P - \delta_{l\alpha}^P \delta_{k\beta}^P) \right] \\ &= \langle ab | \hat{v} | \widetilde{\beta\alpha} \rangle. \end{aligned}$$

donc,

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\beta \rangle = \langle ab | \hat{v} | \widetilde{\beta\alpha} \rangle. \quad (\text{D.9})$$

Il est clair que dans ce cas les éléments de l'opérateur \hat{U}_{HF} sont nuls.

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{U}_{HF} | \Phi_\beta \rangle = \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \langle \Phi_\alpha | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b | \Phi_\alpha \rangle = 0. \quad (\text{D.10})$$

de (D.9) et (D.10)

$$\langle \Phi_\alpha | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\beta \rangle = \langle ab | \hat{v} | \widetilde{\beta\alpha} \rangle. \quad (\text{D.11})$$

D.2 Avec corrélations neutron-proton

Nous allons calculer dans ce qui suit, les éléments de la matrice d'interaction V_{res} neutron-proton ($\nu\pi$), entre les états à N corps couplés $|\Phi_\alpha^{(\nu\pi)}\rangle = |(n\text{pnh})_\nu(m\text{pnh})_\pi\rangle$. Sachant que le terme antisymétrique de l'interaction entre deux particules non identiques sera null.

D.2.1 entre deux états identiques

$$\begin{aligned}
 |\Phi_\alpha^{(\nu\pi)}\rangle &= |\Phi_\beta^{(\nu\pi)}\rangle \\
 \bullet \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V} | \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k | \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} \rangle \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \left[\delta_{ik}^{T(\Phi_\alpha)} \delta_{jl}^{T(\Phi_\alpha)} - \delta_{il}^{T(\Phi_\alpha)} \delta_{jk}^{T(\Phi_\alpha)} \right] \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{kl} \left[\langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle - \langle lk | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \right] \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{kl}^{T(\Phi_\alpha^{(\nu\pi)})} \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \left[\sum_k^{T(\Phi_\alpha^\nu)} \sum_l^{T(\Phi_\alpha^\pi)} + \sum_k^{T(\Phi_\alpha^\pi)} \sum_l^{T(\Phi_\alpha^\nu)} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle + \sum_k^{T(\Phi_\alpha^\nu)} \sum_l^{T(\Phi_\alpha^\pi)} \langle kl | \hat{v} | kl \rangle.
 \end{aligned}$$

En remplaçant les sommations par l'équation (D.2), on trouve

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V} | \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} \rangle &= \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\left[\sum_k^{t_{HF\nu}} \sum_l^{t_{HF\nu}} + 2 \sum_k^{t_{HF\nu}} \sum_l^{p_\nu} - 2 \sum_k^{t_{HF\nu}} \sum_l^{t_\nu} \right. \\ &\quad \left. + \sum_k^{p_\nu} \sum_l^{p_\nu} + \sum_k^{t_\nu} \sum_l^{t_\nu} - \sum_k^{p_\nu} \sum_l^{t_\nu} - \sum_k^{t_\nu} \sum_l^{p_\nu} \right] \\ &+ \left[\sum_k^{t_{HF\pi}} \sum_l^{t_{HF\pi}} + 2 \sum_k^{t_{HF\pi}} \sum_l^{p_\pi} - 2 \sum_k^{t_{HF\pi}} \sum_l^{t_\pi} \right. \\ &\quad \left. + \sum_k^{p_\pi} \sum_l^{p_\pi} + \sum_k^{t_\pi} \sum_l^{t_\pi} - \sum_k^{p_\pi} \sum_l^{t_\pi} - \sum_k^{t_\pi} \sum_l^{p_\pi} \right] \end{aligned} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &+ \left[\begin{aligned} &\sum_k^{t_{HF\nu}} \sum_l^{t_{HF\pi}} + \sum_k^{t_{HF\nu}} \sum_l^{p_\pi} - \sum_k^{t_{HF\nu}} \sum_l^{t_\pi} \\ &\quad + \sum_k^{p_\nu} \sum_l^{t_{HF\pi}} + \sum_k^{p_\nu} \sum_l^{p_\pi} - \sum_k^{p_\nu} \sum_l^{t_\pi} \\ &\quad - \sum_k^{t_\nu} \sum_l^{t_{HF\pi}} - \sum_k^{t_\nu} \sum_l^{p_\pi} + \sum_k^{t_\nu} \sum_l^{t_\pi} \end{aligned} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle.
 \end{aligned} \tag{D.12}$$

où de façon plus générale

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V} | \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\tau=\nu,\pi} \left[\begin{aligned} &\sum_k^{t_{HF\tau}} \sum_l^{t_{HF\tau}} + 2 \sum_k^{t_{HF\tau}} \sum_l^{p_\tau} - 2 \sum_k^{t_{HF\tau}} \sum_l^{t_\tau} \\ &\quad + \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{p_\tau} + \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{t_\tau} - \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_\tau} - \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{p_\tau} \end{aligned} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &+ \sum_{\tau < \tau' = \nu, \pi} \left[\begin{aligned} &\sum_k^{t_{HF\tau}} \sum_l^{t_{HF\tau'}} + \sum_k^{t_{HF\tau}} \sum_l^{p_{\tau'}} - \sum_k^{t_{HF\tau}} \sum_l^{t_{\tau'}} \\ &\quad + \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_{HF\tau'}} + \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{p_{\tau'}} - \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_{\tau'}} \\ &\quad - \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{t_{HF\tau'}} - \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{p_{\tau'}} + \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{t_{\tau'}} \end{aligned} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} \rangle &= \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \langle \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} | \hat{a}_k^{\dagger} \hat{a}_l | \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} \rangle \\
 &= \sum_{kl} \langle k | \hat{u} | l \rangle \delta_{kl}^{T(\Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)})} \\
 &= \sum_k^{T(\Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)})} \langle k | \hat{u} | k \rangle \\
 &= \sum_k^{T(\Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)})} \sum_l^{t_{\text{HF}}} \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &= \left[\sum_k^{T(\Phi_{\alpha}^{\nu})} \sum_l^{t_{\text{HF}\nu}} + \sum_k^{T(\Phi_{\alpha}^{\pi})} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle + \left[\sum_k^{T(\Phi_{\alpha}^{\nu})} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} + \sum_k^{T(\Phi_{\alpha}^{\pi})} \sum_l^{t_{\text{HF}\nu}} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle
 \end{aligned}$$

En remplaçant les sommations par l'équation (D.2) on trouve

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} \rangle &= \left[\begin{aligned} &\left[\sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{t_{\text{HF}\nu}} + \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{p_{\nu}} - \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{t_{\nu}} \right] \\ &+ \left[\sum_k^{t_{\text{HF}\pi}} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} + \sum_k^{t_{\text{HF}\pi}} \sum_l^{p_{\pi}} - \sum_k^{t_{\text{HF}\pi}} \sum_l^{t_{\pi}} \right] \end{aligned} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &+ \left[2 \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} + \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{p_{\pi}} - \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{t_{\pi}} + \sum_k^{p_{\nu}} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} - \sum_k^{t_{\nu}} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle.
 \end{aligned} \tag{D.13}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} \rangle &= \sum_{\tau=\nu,\pi} \left[\sum_k^{t_{\text{HF}\tau}} \sum_l^{t_{\text{HF}\tau}} + \sum_k^{t_{\text{HF}\tau}} \sum_l^{p_{\tau}} - \sum_k^{t_{\text{HF}\tau}} \sum_l^{t_{\tau}} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &+ \sum_{\tau < \tau'=\nu,\pi} \left[2 \sum_k^{t_{\text{HF}\tau}} \sum_l^{t_{\text{HF}\tau'}} + \sum_k^{t_{\text{HF}\tau}} \sum_l^{p_{\tau'}} - \sum_k^{t_{\text{HF}\tau}} \sum_l^{t_{\tau'}} \right. \\
 &\quad \left. + \sum_k^{p_{\tau}} \sum_l^{t_{\text{HF}\tau'}} - \sum_k^{t_{\tau}} \sum_l^{t_{\text{HF}\tau'}} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle.
 \end{aligned}$$

Les premiers crochets dans les équations (D.12) et (D.13) sont résultat de corrélations entre $(\nu\nu)$ et $(\pi\pi)$, et les deuxièmes sont le résultat des corrélations entre $(\nu\pi)$.

En retranchant (D.13) de (D.12), on trouve les éléments de la matrice d'interaction résiduelle,

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_{\alpha}^{(\nu\pi)} \rangle &= \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\left[- \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{t_{\text{HF}\nu}} + \sum_k^{p_{\nu}} \sum_l^{p_{\nu}} + \sum_k^{t_{\nu}} \sum_l^{t_{\nu}} - 2 \sum_k^{p_{\nu}} \sum_l^{t_{\nu}} \right] + \\ &\left[- \sum_k^{t_{\text{HF}\pi}} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} + \sum_k^{p_{\pi}} \sum_l^{p_{\pi}} + \sum_k^{t_{\pi}} \sum_l^{t_{\pi}} - 2 \sum_k^{p_{\pi}} \sum_l^{t_{\pi}} \right] \end{aligned} \right] \langle kl | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle \\
 &+ \left[- \sum_k^{t_{\text{HF}\nu}} \sum_l^{t_{\text{HF}\pi}} + \sum_k^{p_{\nu}} \sum_l^{p_{\pi}} - \sum_k^{p_{\nu}} \sum_l^{t_{\pi}} - \sum_k^{t_{\nu}} \sum_l^{p_{\pi}} + \sum_k^{t_{\nu}} \sum_l^{t_{\pi}} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle \\
 &+ \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle.
 \end{aligned}$$

Et puisque, généralement

$$\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2} \left(\sum_k \sum_l^{t_{HF\nu} t_{HF\nu}} + \sum_k \sum_l^{t_{HF\pi} t_{HF\pi}} \right) \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle + \sum_k \sum_l^{t_{HF\nu} t_{HF\pi}} \langle kl | \hat{v} | kl \rangle.$$

où les deux premiers termes contribuent dans le cas de corrélations entre $\nu - \nu$ et $\pi - \pi$, et le dernier terme contribue dans le cas de corrélations entre $\nu - \pi$. Dans ce cas on obtient le résultat final,

$$\begin{aligned} \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} \rangle &= \sum_{\tau=\nu,\pi} \left[\sum_{k<l}^{p_\tau} + \sum_{k<l}^{t_\tau} - \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_\tau} \right] \langle kl | \hat{v} | \widetilde{kl} \rangle \\ &+ \sum_{\tau < \tau' = \nu, \pi} \left[\sum_k^{p_\tau} \sum_l^{p_{\tau'}} - \sum_k^{p_\tau} \sum_l^{t_{\tau'}} - \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{p_{\tau'}} + \sum_k^{t_\tau} \sum_l^{t_{\tau'}} \right] \langle kl | \hat{v} | kl \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

D.2.2 entre deux états qui diffèrent par une particule

$$|\Phi_\beta^{(\nu\pi)}\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_a |\Phi_\alpha^{(\nu\pi)}\rangle$$

Par hypothèse $\tau_\alpha = \tau_a$

$$\bullet \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V} | \Phi_\beta^{(\nu\pi)} \rangle = \left[\sum_k^{t_{HF\tau}} + \sum_k^{p_\tau} - \sum_k^{t_\tau} \right] \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle + \left[\sum_k^{t_{HF\tau'}} + \sum_k^{p_{\tau'}} - \sum_k^{t_{\tau'}} \right] \langle ka | \hat{v} | k\alpha \rangle.$$

avec la condition ici et dans ce qui suit $\tau_\alpha = \tau_a \neq \tau'_k$.

$$\begin{aligned} \bullet \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\beta^{(\nu\pi)} \rangle &= \langle a | \hat{u} | \alpha \rangle \\ &= \sum_k^{t_{HF\tau}} \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle + \sum_k^{t_{HF\tau'}} \langle ka | \hat{v} | k\alpha \rangle. \end{aligned}$$

Donc les éléments de matrice de l'interaction résiduelle sont

$$\langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\beta^{(\nu\pi)} \rangle = \left[\sum_k^{p_\tau} - \sum_k^{t_\tau} \right] \langle ka | \hat{v} | \widetilde{k\alpha} \rangle + \left[\sum_k^{p_{\tau'}} - \sum_k^{t_{\tau'}} \right] \langle ka | \hat{v} | k\alpha \rangle. \quad (\text{D.15})$$

D.2.3 entre deux états qui diffèrent par deux particules

$$|\Phi_\beta\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b |\Phi_\beta\rangle$$

Par hypothèse $\tau_\alpha = \tau_a$ et $\tau'_\beta = \tau'_b$ avec $\tau \neq \tau'$ dans le cas de la partie d'interaction $\nu - \pi$.

$$\bullet \langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V} | \Phi_\beta^{(\nu\pi)} \rangle = \langle ab | \hat{v} | \beta\alpha \rangle.$$

Puisque $\langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_\beta^{(\nu\pi)} \rangle = 0$

donc

$$\langle \Phi_\alpha^{(\nu\pi)} | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_\beta^{(\nu\pi)} \rangle = \langle ab | \hat{v} | \beta\alpha \rangle. \quad (\text{D.16})$$

Annexe E

Le moment Quadrapolaire

Dans cet annexe nous allons présenter tous les calculs liés au moment quadrapolaire.

E.1 Opérateur moment quadrapolaire

Les opérateurs multipolaires électriques \hat{Q}_l^m sont définis [113] tel que,

$$\hat{Q}_l^m(r) = q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{E.1})$$

avec

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}$$

sont les harmoniques sphériques.

Le moment quadrapolaire $l = 2$ isoscalaire est

$$\hat{Q}_m^{l=2, \tau=0} = \sum_i r_i^2 Y_2^m(r_i)$$

et dans le cas isovecteur

$$\hat{Q}_m^{l=2, \tau=1} = \sum_i \tau_z r_i^2 Y_2^m(r_i)$$

avec $\tau_z = 1$ le cas d'un proton, et $\tau_z = -1$ le cas d'un neutron [67].

En remplaçant par les expressions des harmoniques sphériques [113] pour différentes valeurs de $m = 0, \pm 1, \pm 2$,

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1).$$

et en tenant compte des composantes cartésiennes x, y, z en fonction des composantes sphériques r, θ, φ

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

nous obtenons les moment quadrupolaires d'ordre ($l = 2$) de l'équation (E.1) en représentation cartésienne,

$$\begin{aligned}\hat{Q}_2^{\pm 2} &= q \sqrt{\frac{4\pi}{5}} r^2 Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = q \sqrt{\frac{3}{8}} (x \pm iy)^2 \\ \hat{Q}_2^{\pm 1} &= q \sqrt{\frac{4\pi}{5}} r^2 Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp q \sqrt{\frac{3}{2}} z(x \pm iy) \\ \hat{Q}_2^0 &= q \sqrt{\frac{4\pi}{5}} r^2 Y_2^0(\theta, \varphi) = q \frac{1}{2} (3z^2 - r^2).\end{aligned}$$

E.2 L'opérateur quadrupolaire exprimé en fonction d'opérateurs de création et d'annihilation

Les opérateurs bosoniques de création et d'annihilation sont définis d'après [95] par

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_i x_i - \frac{1}{c_i} \partial_i \right), \quad \hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_i x_i + \frac{1}{c_i} \partial_i \right)$$

avec $c_i = \sqrt{m\omega_i/\hbar}$ et $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$.

Les transformations canoniques unitaires qui mélangent les opérateurs \hat{a}_i^\dagger et \hat{a}_i sont :

$$\hat{b}_\alpha^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_x^\dagger + i\hat{a}_y^\dagger \right), \quad \hat{b}_\beta^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_x^\dagger - i\hat{a}_y^\dagger \right)$$

on obtient les coordonnées cartésiennes en fonction de ces opérateurs

$$\begin{aligned}x &= \frac{1}{2c_\perp} \left(b_\alpha^\dagger + b_\beta^\dagger + b_\alpha + b_\beta \right) \\ y &= \frac{i}{2c_\perp} \left(-b_\alpha^\dagger + b_\beta^\dagger + b_\alpha - b_\beta \right) \\ z &= \frac{1}{\sqrt{2}c_z} \left(a_z^\dagger + a_z \right),\end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned}x \pm iy &= \frac{1}{2c_\perp} \left[b_\alpha^\dagger + b_\beta^\dagger + b_\alpha + b_\beta \mp (-b_\alpha^\dagger + b_\beta^\dagger + b_\alpha - b_\beta) \right] \\ &= \begin{cases} (+) & \frac{1}{c_\perp} (b_\alpha^\dagger + b_\beta) \\ (-) & \frac{1}{c_\perp} (b_\beta^\dagger + b_\alpha) \end{cases} \\ x^2 + y^2 &= \frac{1}{c_\perp^2} (1 + N_\perp + N_+ + N_-) \\ z^2 &= \frac{1}{2c_z^2} (1 + 2N_z + (a_z^\dagger)^2 + (a_z)^2).\end{aligned}$$

avec

$$N_+ = b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger, \quad N_- = b_\alpha b_\beta, \quad N_\perp = b_\alpha^\dagger b_\alpha + b_\beta^\dagger b_\beta, \quad N_z = a_z^\dagger a_z$$

Donc l'expression des opérateurs quadrupolaires en fonction des opérateurs de création et d'annihilation est

$$\begin{aligned}\hat{Q}_2^{\pm 2} &= q\sqrt{\frac{3}{8}}(x \pm iy)^2 \\ &= \begin{cases} q\frac{1}{c_\perp^2}\sqrt{\frac{3}{8}}(b_\alpha^\dagger + b_\beta)^2 & m = +2 \\ q\frac{1}{c_\perp^2}\sqrt{\frac{3}{8}}(b_\beta^\dagger + b_\alpha)^2 & m = -2 \end{cases}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}_2^{\pm 1} &= \mp q\sqrt{\frac{3}{2}}z(x \pm iy) \\ &= \begin{cases} -\frac{q}{c_\perp c_z}\frac{\sqrt{3}}{2}(a_z^\dagger + a_z)(b_\alpha^\dagger + b_\beta) & m = +1 \\ \frac{q}{c_\perp c_z}\frac{\sqrt{3}}{2}(a_z^\dagger + a_z)(b_\beta^\dagger + b_\alpha) & m = -1 \end{cases}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}_2^0 &= q\frac{1}{2}(3z^2 - r^2) \\ &= q\frac{1}{2}(2z^2 - x^2 - y^2) \\ &= \frac{q}{2}\left[\frac{1}{c_z^2}(1 + 2N_z + a_z^{\dagger 2} + a_z^2) - \frac{1}{c_\perp^2}(1 + N_+ + N_- + N_\perp)\right].\end{aligned}$$

E.3 Les éléments de matrice de l'opérateur quadrupolaire

Les éléments de matrice de l'opérateur quadrupolaire entre les états de B.O.H.S.A $|i\rangle \equiv |nz_i, \alpha_i, \beta_i, \Sigma_i\rangle$, et $|j\rangle \equiv |nz_j, \alpha_j, \beta_j, \Sigma_j\rangle$, définis avant dans la section (3.1), tel que les opérateurs bosoniques b^\dagger et b vérifient les relations,

$$b_\alpha^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\alpha+1}|\alpha+1\rangle, \quad b_\alpha|\alpha\rangle = \sqrt{\alpha}|\alpha-1\rangle, \quad [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}.$$

sont

$$\begin{aligned}\bullet \langle i|\hat{Q}_2^{+2}|j\rangle &= q\frac{1}{c_\perp^2}\sqrt{\frac{3}{8}}\langle i|(b_\alpha^\dagger + b_\beta)^2|j\rangle \\ &= \frac{q}{c_\perp^2}\sqrt{\frac{3}{8}}\delta_{\Sigma_i\Sigma_j}\delta_{nz_inz_j}\langle \alpha_i\beta_i|(b_\alpha^{\dagger 2} + b_\beta^2 + b_\alpha^\dagger b_\beta + b_\beta b_\alpha^\dagger)|\alpha_j\beta_j\rangle \\ &= \frac{q}{c_\perp^2}\sqrt{\frac{3}{8}}\delta_{\Sigma_i\Sigma_j}\delta_{nz_inz_j}\left[\sqrt{(\alpha_j+1)(\alpha_j+2)}\delta_{\alpha_i,\alpha_j+2}\delta_{\beta_i,\beta_j} + \sqrt{\beta_j(\beta_j-1)}\delta_{\alpha_i,\alpha_j}\delta_{\beta_i,\beta_j-2}\right. \\ &\quad \left.- 2\sqrt{\beta_j(\alpha_j+1)}\delta_{\alpha_i,\alpha_j+1}\delta_{\beta_i,\beta_j-1}\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle i | \hat{Q}_2^{-2} | j \rangle &= \frac{1}{c_\perp^2} \sqrt{\frac{3}{8}} \langle i | (b_\beta^\dagger + b_\alpha)^2 | j \rangle \\
 &= \frac{q}{c_\perp^2} \sqrt{\frac{3}{8}} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \delta_{nz_i nz_j} \langle \alpha_i \beta_i | (b_\beta^{\dagger 2} + b_\alpha^2 + b_\beta^\dagger b_\alpha + b_\alpha b_\beta^\dagger) | \alpha_j \beta_j \rangle \\
 &= \frac{q}{c_\perp^2} \sqrt{\frac{3}{8}} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \delta_{nz_i nz_j} \left[\sqrt{(\beta_j + 1)(\beta_j + 2)} \delta_{\beta_i, \beta_j + 2} \delta_{\alpha_i, \alpha_j} + \sqrt{\alpha_j(\alpha_j - 1)} \delta_{\beta_i, \beta_j} \delta_{\alpha_i, \alpha_j - 2} \right. \\
 &\quad \left. - 2 \sqrt{\alpha_j(\beta_j + 1)} \delta_{\beta_i, \beta_j + 1} \delta_{\alpha_i, \alpha_j - 1} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle i | \hat{Q}_2^{+1} | j \rangle &= -\frac{q}{c_\perp c_z} \frac{\sqrt{3}}{2} \langle i | (a_z^\dagger + a_z) (b_\alpha^\dagger + b_\beta) | j \rangle \\
 &= -\frac{q}{c_\perp c_z} \frac{\sqrt{3}}{2} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \left[(\sqrt{nz_j} \delta_{nz_i, nz_j - 1} + \sqrt{nz_j + 1} \delta_{nz_i, nz_j + 1}) \langle \alpha_i \beta_i | b_\alpha^\dagger + b_\beta | \alpha_j \beta_j \rangle \right] \\
 &= -\frac{q}{c_\perp c_z} \frac{\sqrt{3}}{2} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \left[(\sqrt{nz_j} \delta_{nz_i, nz_j - 1} + \sqrt{nz_j + 1} \delta_{nz_i, nz_j + 1}) (\sqrt{\alpha_j + 1} \delta_{\alpha_i, \alpha_j + 1} \delta_{\beta_i, \beta_j} \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\beta_j} \delta_{\alpha_i, \alpha_j} \delta_{\beta_i, \beta_j - 1}) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle i | \hat{Q}_2^{-1} | j \rangle &= \frac{q}{c_\perp c_z} \frac{\sqrt{3}}{2} \langle i | (a_z^\dagger + a_z) (b_\beta^\dagger + b_\alpha) | j \rangle \\
 &= \frac{q}{c_\perp c_z} \frac{\sqrt{3}}{2} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \left[(\sqrt{nz_j} \delta_{nz_i, nz_j - 1} + \sqrt{nz_j + 1} \delta_{nz_i, nz_j + 1}) \langle \alpha_i \beta_i | b_\beta^\dagger + b_\alpha | \alpha_j \beta_j \rangle \right] \\
 &= \frac{q}{c_\perp c_z} \frac{\sqrt{3}}{2} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \left[(\sqrt{nz_j} \delta_{nz_i, nz_j - 1} + \sqrt{nz_j + 1} \delta_{nz_i, nz_j + 1}) (-\sqrt{\beta_j + 1} \delta_{\beta_i, \beta_j + 1} \delta_{\alpha_i, \alpha_j} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{\alpha_j} \delta_{\beta_i, \beta_j} \delta_{\alpha_i, \alpha_j - 1}) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \langle i | \hat{Q}_2^0 | j \rangle &= \frac{q}{2} \langle nz_i, \alpha_i, \beta_i | \left[\frac{1}{c_z^2} (1 + 2N_z + a_z^{\dagger 2} + a_z^2) - \frac{1}{c_\perp^2} (1 + N_+ + N_- + N_\perp) \right] | nz_j, \alpha_j, \beta_j \rangle \\
 &= \frac{q}{2} \delta_{\Sigma_i \Sigma_j} \left[\frac{1}{c_z^2} \delta_{\alpha_i, \alpha_j} \delta_{\beta_i, \beta_j} [(1 + 2nz_j) \delta_{nz_i, nz_j} + \sqrt{(nz_j + 1)(nz_j + 2)} \delta_{nz_i, nz_j + 2} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{nz_j(nz_j - 1)} \delta_{nz_i, nz_j - 2}] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{c_\perp^2} \delta_{nz_i, nz_j} [(1 + \alpha_j + \beta_j) \delta_{\alpha_i, \alpha_j} \delta_{\beta_i, \beta_j} - \sqrt{(\alpha_j + 1)(\beta_j + 1)} \delta_{\alpha_i, \alpha_j + 1} \delta_{\beta_i, \beta_j + 1} \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\alpha_j \beta_j} \delta_{\alpha_i, \alpha_j - 1} \delta_{\beta_i, \beta_j - 1}] \right]
 \end{aligned}$$

Les règles de sélection sur la parité et le moment angulaire entre l'état initial et l'état final sont,

$$\begin{cases} \pi_i = \pi_f \\ K_i = m K_f \end{cases}$$

E.4 L'invariance de l'interaction $\hat{Q}\hat{Q}$ par rotation

D'après [37] $\hat{Q}\hat{Q}$ peut être décomposée

$$\hat{Q}_l \hat{Q}_l = \sum_m \hat{Q}_{lm}^* \hat{Q}_{lm} = \sum_m (-1)^m \hat{Q}_l^m \hat{Q}_l^{-m}$$

avec l'expression des moments quadrupolaire \hat{Q}_l^m était défini dans (E.1), donc

$$\begin{aligned} \hat{Q}(r_1) \hat{Q}(r_2) &= \sum_m (-1)^m \hat{Q}_l^m(r_1) \hat{Q}_l^{-m}(r_2) \\ &= q^2 \frac{4\pi}{2l+1} r_1^l r_2^l \sum_m (-1)^m Y_l^m(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2) \end{aligned}$$

Puisque les angles (θ, ϕ) reste constante en changeant la position, en appliquant l'opérateur P_r de changement de coordonnées sur $\hat{Q}\hat{Q}$, on obtient

$$\begin{aligned} P_r \hat{Q}(r_1) \hat{Q}(r_2) &= P_r q^2 \frac{4\pi}{2l+1} r_1^l r_2^l \sum_m (-1)^m Y_l^m(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2) \\ &= q^2 \frac{4\pi}{2l+1} r_2^l r_1^l \sum_m (-1)^m Y_l^m(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2) \\ &= \hat{Q}\hat{Q} \end{aligned}$$

Donc $\hat{Q}\hat{Q}$ est invariante par changement des coordonnées.

E.5 Calcul des règles de somme d'ordre $k = 1$

Le but dans cette section est d'évaluer la règle de somme d'ordre $k = 1$ définit dans l'équation (3.4), pour prouver nos résultats dans l'équation (3.5).

E.5.1 Les cas monopole et quadrupole

Les moments monopolaire ($l = 0$) et quadrupolaire ($l = 2$) sont tels que,

$$\left. \begin{aligned} \hat{Q}_{monopole} &= x^2 + y^2 + z^2 \\ \hat{Q}_{quadrupole} &= 2z^2 - x^2 - y^2 \end{aligned} \right\} \implies \hat{Q} = \alpha(x^2 + y^2 + \beta z^2).$$

Puisque $\hat{Q} = f(x, y, z)$, donc seul l'opérateur énergie cinétique contribue au commutateur

$$[\hat{Q}, \hat{H}] = [\hat{Q}, \hat{T}], \quad \text{avec} \quad \hat{T} = \sum_i \frac{\hat{P}_i^2}{2m}$$

Les opérateurs de position et d'impulsion doivent vérifier les relations de commutations suivantes,

$$[\hat{x}, \hat{P}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{P}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{P}_z] = i\hbar.$$

et puisque

$$\left[\hat{P}_x^2, \hat{x}^2\right] = \hat{P}_x \left[\hat{P}_x, \hat{x}^2\right] + \left[\hat{P}_x, \hat{x}^2\right] \hat{P}_x = -2i\hbar(2\hat{x}\hat{P}_x - i\hbar).$$

De la même façon on trouve

$$\left[P_y^2, y^2\right] = -2i\hbar(2yP_y - i\hbar), \quad \left[P_z^2, z^2\right] = -2i\hbar(2zP_z - i\hbar).$$

Donc

$$\begin{aligned} \left[\hat{T}, \hat{Q}\right] &= \frac{\alpha}{2m} \left(-2i\hbar(2xP_x - i\hbar) - 2i\hbar(2yP_y - i\hbar) - 2i\hbar\beta(2zP_z - i\hbar) \right) \\ &= \frac{-i\hbar\alpha}{m} \left(2(xP_x + yP_y + \beta zP_z) - i\hbar(2 + \beta) \right). \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \left[\hat{Q}, [\hat{T}, \hat{Q}]\right] &= \frac{-i\hbar\alpha^2}{m} \left[x^2 + y^2 + \beta z^2, 2(xP_x + yP_y + \beta zP_z) - i\hbar(2 + \beta) \right] \\ &= \frac{-2i\hbar\alpha^2}{m} \left[x^2 + y^2 + \beta z^2, xP_x + yP_y + \beta zP_z \right] \\ &= \frac{-2i\hbar\alpha^2}{m} \left([x^2, xP_x] + [y^2, yP_y] + \beta^2 [z^2, zP_z] \right) \\ &= \frac{4\hbar^2\alpha^2}{m} (x^2 + y^2 + \beta^2 z^2). \end{aligned} \tag{E.2}$$

sachant que $[x^2, xP_x] = 2i\hbar x^2$.

En remplaçant l'équation (E.2) dans l'équation (3.4), nous obtenons les règles de somme d'ordre 1 dans les deux cas monopolaire et quadrupolaire

$$m_1 = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m} \langle 0 | (x^2 + y^2 + \beta^2 z^2) | 0 \rangle = \begin{cases} \frac{2\hbar^2}{m} \langle \hat{r}^2 \rangle (MeV.f m^4) & l = 0 \\ \frac{4\hbar^2}{m} \langle \hat{r}^2 + \frac{\hat{Q}}{2} \rangle (MeV.f m^4) & l = 2 \end{cases} \tag{E.3}$$

Mais dans plusieurs références par exemple dans [1, 37], les règles de somme d'ordre $k = 1$ pour n'importe quelle surface vibrationnelle $\hat{Q}_l^0 = r^l Y_l^0$ sont

$$m_1 = \frac{\hbar^2}{2m} A \langle 0 | (\nabla r^l Y_l^0)^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(2l+1)}{4\pi} A \langle r^{2l-2} \rangle. \tag{E.4}$$

Dans le cas quadrupole l'équation (E.4) est proportionnelle à $\langle r^2 \rangle$. Ce résultat est différent à celui de nos résultats obtenus dans l'équation (E.3) (à voir après).

Annexe F

Le calcul détaillé de quelques propriétés d'un gaz de Fermions

F.1 Calcul de $C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$

À température $T=0$, la MDB est définie par

$$\begin{aligned} C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) &= \langle \vec{r} | e^{-\beta \hat{H}} | \vec{r}' \rangle \\ &= \sum_{ij} \langle \vec{r} | i \rangle \langle i | e^{-\beta \hat{H}} | j \rangle \langle j | \vec{r}' \rangle \\ &= \sum_{ij} \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') \delta_{ij} e^{-\beta \varepsilon_j} \\ &= \sum_i \varphi_i(\vec{r}) \varphi_i^*(\vec{r}') e^{-\beta \varepsilon_i} \end{aligned}$$

La MDB vérifie

$$\frac{\partial C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)}{\partial \beta} + \hat{H} C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = 0. \quad (\text{F.1})$$

avec la condition initiale à $\beta = 0$, $C_0(\vec{r}, \vec{r}'; 0) = \delta(\vec{r}, \vec{r}')$

Pour l'Hamiltonien (5.4), la solution de (F.1) a été obtenue par les auteurs de la référence [110], elle s'écrit

$$C(\vec{r}, \vec{r}', \beta) = f(\beta) \exp \left[-i(xy' - yx')\phi(\beta) - \left((x' - x)^2 + (y' - y)^2 \right) g(\beta) - \left((x' + x)^2 + (y' + y)^2 \right) h(\beta) \right]. \quad (\text{F.2})$$

Avec

$$\begin{aligned} f(\beta) &= \frac{m\omega_L\omega_0}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} \\ \phi(\beta) &= \frac{m\omega_L\omega_0}{\hbar} \frac{\sinh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} \\ g(\beta) &= \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} \left(\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) + \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} \right) \\ h(\beta) &= \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} \left(\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) - \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} \right) \end{aligned}$$

où $\omega_0 = (1 + \frac{\omega_h^2}{\omega_L^2})^{\frac{1}{2}}$.

En remplaçant les fonctions f, ϕ, g et h dans l'équation (F.2), nous obtenons,

$$C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = \frac{m\omega_L\omega_0}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} e^{\frac{-im\omega_L\omega_0}{\hbar}(xy' - yx') \frac{\sinh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}} \\ e^{-[(x'-x)^2 + (y'-y)^2] \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} [\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) + \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}]} \\ e^{-[(x'+x)^2 + (y'+y)^2] \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} [\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) - \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}]}. \quad (F.3)$$

qui est le même résultat que celui obtenu dans la référence [107].

En fonction des coordonnées du centre de masse et relative respectivement

$$\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}, \quad \vec{S} = \vec{r} - \vec{r}',$$

l'expression de la MDB devient

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{m\omega_L\omega_0}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)} e^{\frac{-im\omega_L\omega_0}{\hbar}(S_x R_y - R_x S_y) \frac{\sinh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}} \\ e^{-S^2 \frac{m\omega_L\omega_0}{4\hbar} [\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) + \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}]} \\ e^{-R^2 \frac{m\omega_L\omega_0}{\hbar} [\coth(\hbar\omega_L\omega_0\beta) - \frac{\cosh(\hbar\omega_L\beta)}{\sinh(\hbar\omega_L\omega_0\beta)}]}. \quad (F.4)$$

en mettant $\omega = \frac{\omega_L}{\Omega}$, où $\Omega = \sqrt{\omega_h^2 + \omega_L^2} = \omega_L\omega_0$, l'équation (F.4) devient après un scaling aux échelles d'unité pour les énergies et les longueurs $\sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}$ et $\hbar\Omega$ respectivement,

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-i(S_x R_y - R_x S_y) \frac{\sinh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)}} e^{-(\frac{S^2}{4} + R^2) \coth(\beta)} e^{(R^2 - \frac{S^2}{4}) \frac{\cosh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)}}. \quad (F.5)$$

Dans ce qui suit, nous avons utilisé deux méthodes de calculs, dont la première nous avons séparé toute dépendance au champ magnétique, et la deuxième sous forme plus simple, qui sera utilisée pour calculer d'autres grandeurs physiques.

Méthode 1

En remplaçant dans l'équation (F.5) par les relations trigonométriques [107]

$$\frac{\cosh(\beta) - \cosh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)} = \tanh(\beta/2) - 2 \frac{\sinh^2(\omega\beta/2)}{\sinh(\beta)} \\ \frac{\cosh(\beta) + \cosh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)} = \coth(\beta/2) + 2 \frac{\sinh^2(\omega\beta/2)}{\sinh(\beta)},$$

la MDB devient

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-R^2 \tanh(\beta/2) - \frac{S^2}{4} \coth(\beta/2)} e^{U(\vec{R}, \vec{S}, \omega; \beta)}, \quad (F.6)$$

où le potentiel effectif est tel que

$$U(\vec{R}, \vec{S}, \omega; \beta) = 2\left(R^2 - \frac{S^2}{4}\right) \frac{\sinh^2(\omega\beta/2)}{\sinh(\beta)} - i(S_x R_y - R_x S_y) \frac{\sinh(\omega\beta)}{\sinh(\beta)}.$$

Il inclut toute dépendance au champ magnétique, tel que si $B=0 \Rightarrow \omega_L = 0 \Rightarrow \omega = 0 \Rightarrow U(\vec{R}, \vec{S}, \omega; \beta) = 0$, nous obtenons

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-R^2 \tanh(\beta/2) - \frac{S^2}{4} \coth(\beta/2)},$$

qui est dans ce cas la MDB d'un système d'électrons sous l'effet d'un OH à 2 dimensions.

Méthode 2

La MDB dans l'équation (F.5) devient

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-(\frac{S^2}{4} + R^2) \coth(\beta)} e^{[(R^2 - \frac{S^2}{4}) - i(S_x R_y - R_x S_y)] \frac{e^{\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} e^{[(R^2 - \frac{S^2}{4}) + i(S_x R_y + R_x S_y)] \frac{e^{-\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}},$$

sachant que,

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}.$$

En remplaçant par,

$$A = R^2 + \frac{S^2}{4}, \quad D = R^2 - \frac{S^2}{4} - i(S_x R_y - R_x S_y).$$

la MDB devient sous forme plus simple

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-A \coth(\beta)} e^{D \frac{e^{\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} e^{D^* \frac{e^{-\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}}. \quad (\text{F.7})$$

où D^* est le complexe conjugué de D .

En développant les deux derniers exponentielles en série de Taylor, de telle sorte,

$$e^{D \frac{e^{\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} = \sum_m \frac{D^m}{m!} \frac{e^{\omega m \beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^m}$$

$$e^{D^* \frac{e^{-\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} = \sum_n \frac{D^{*n}}{n!} \frac{e^{\omega n \beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^m}$$

et sachant d'après [107] que,

$$e^{-A \coth(\beta)} = \sum_{k=0}^{\infty} L_k^{d/2-1}(2A) e^{-A} e^{-(2k + \frac{d}{2})\beta} (e^\beta - e^{-\beta})^{d/2}.$$

où $L_k^p(x)$ sont les polynômes de Laguerre généralisés, définis dans [111] par,

$$L_k^p(x) = \sum_{s=0}^k (-1)^s \frac{[(k+p)!]}{(k-s)!(p+s)!s!} x^s,$$

En mettant $\frac{d}{2} = m + n + 1$, l'équation (F.7) devient

$$\begin{aligned}
 C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) &= \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n}(2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} \\
 &\quad e^{-(2k+m+n+1)\beta} (e^\beta - e^{-\beta})^{(m+n+1)} \frac{e^{\omega m \beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^m} \frac{e^{-\omega n \beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^n} \\
 &= \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n}(2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} \\
 &\quad e^{-(2k+m+n+1)\beta} (e^\beta - e^{-\beta})^{(m+n+1)} \frac{e^{\omega(m-n)\beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^{m+n+1}}.
 \end{aligned}$$

Finalement, nous obtenons l'expression de la MDB sous la forme la plus simple, et avec juste quelques sommations, la même obtenue par [108],

$$C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n}(2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} e^{-[2k+1+(1+\omega)n+(1-\omega)m]\beta}. \quad (\text{F.8})$$

F.2 Calcul de $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$

Les éléments de la matrice densité d'ordre 1 sont définis entre les états individuels, qui sont solutions de l'équation de Schrödinger par

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i \varphi_i(\vec{r}) \varphi_i^*(\vec{r}') \Theta(\lambda - \varepsilon_i).$$

où λ représente l'énergie de Fermi, et $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside définie par

$$\Theta(x) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{e^{xt}}{t} dt.$$

Puisque

$$\begin{aligned}
 \rho(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{2\pi i} \sum_i \varphi_i(\vec{r}) \varphi_i^*(\vec{r}') \int \frac{e^{\beta(\lambda - \varepsilon_i)}}{\beta} d\beta \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int \frac{e^{\beta\lambda}}{\beta} \sum_i \varphi_i(\vec{r}) \varphi_i^*(\vec{r}') e^{-\beta\varepsilon_i} d\beta \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int e^{\beta\lambda} \frac{C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)}{\beta} d\beta,
 \end{aligned}$$

donc

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{2C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)}{\beta} \right]. \quad (\text{F.9})$$

Ceci montre que les éléments de la matrice densité sont obtenus par la transformée de Laplace inverse de la MDB.

F.3 Calcul de $\vec{J}(\vec{r})$

En remplaçant l'équation (F.8) de la MDB calculée en coordonnées du centre de masse et relative, dans l'équation (F.9), on obtient

$$\rho(\vec{R}, \vec{S}) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n} (2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} \mathcal{L}_{\lambda}^{-1} \left[\frac{e^{-[2k+1+n(1+\omega)+m(1-\omega)]\beta}}{\beta} \right].$$

Puisque

$$\mathcal{L}_{\lambda}^{-1} \left[\frac{e^{-ks}}{s} \right] = \Theta(\lambda - k), \quad (\text{F.10})$$

on obtient les éléments de la matrice densité d'ordre 1

$$\rho(\vec{R}, \vec{S}) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n} (2A) e^{-A} \frac{D^m}{m!} \frac{D^{*n}}{n!} \Theta(\lambda - [2k+1+n(1+\omega)+m(1-\omega)]) \quad (\text{F.11})$$

la densité locale est obtenue pour $\vec{r} = \vec{r}' = \vec{R}$, donc pour $\vec{S} = 0$ l'équation (F.11) devient

$$\rho(\vec{R}) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n} (2R^2) e^{-R^2} \frac{R^{2(m+n)}}{m!n!} \Theta(\lambda - [2k+1+n(1+\omega)+m(1-\omega)]) \quad (\text{F.12})$$

Cette expression de la densité locale est plus simple analytiquement par rapport à celle obtenue par les auteurs de la référence [107]. Ce qui nous a permis de la calculer numériquement plus facilement.

F.3 Calcul de $\vec{J}(\vec{r})$

La densité de courant est définie à partir des éléments de la matrice densité de telle sorte

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2im} (\vec{\nabla}_r - \vec{\nabla}_{r'}) \rho(\vec{r}, \vec{r}')|_{r'=r}.$$

En appliquant un changement de variable, elle devient

$$\vec{J}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{2im} \vec{\nabla}_S \rho(\vec{R}, \vec{S})|_{\vec{S}=0}.$$

De l'équation (F.9) qui donne la relation entre les éléments de la matrice densité et la MDB, la densité de courant devient,

$$\vec{J}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{im} \mathcal{L}_{\beta-\lambda}^{-1} \left[\vec{\nabla}_S \frac{C(\vec{R}, \vec{S}; \beta)}{\beta} \right]_{\vec{S}=0} \quad (\text{F.13})$$

à condition que $[\vec{\nabla}, \mathcal{L}^{-1}] = 0$, et puisque

$$\vec{\nabla}_S \frac{C(\vec{R}, \vec{S}; \beta)}{\beta} |_{\vec{S}=0} = i(\vec{k} \wedge \vec{R}) \frac{\sinh(\omega\beta)}{\beta \sinh(\beta)} C(\vec{R}, \vec{S}; \beta) |_{\vec{S}=0},$$

l'équation (F.13) devient

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{R}) &= \frac{\hbar}{2\pi m} (\vec{k} \wedge \vec{R}) \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{\sinh(\omega\beta)}{\beta \sinh^2(\beta)} e^{-R^2 \coth(\beta)} e^{R^2 \frac{\cosh(\omega\beta)}{\sinh \beta}} \right] \\ &= \frac{\hbar}{\pi m} (\vec{k} \wedge \vec{R}) \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{(e^{\omega\beta} - e^{-\omega\beta})}{\beta (e^\beta - e^{-\beta})^2} e^{-R^2 \coth(\beta)} e^{R^2 \frac{e^{\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} e^{R^2 \frac{e^{-\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} \right].\end{aligned}$$

En remplaçant par

$$e^{-R^2 \coth \beta} = \sum_{k=0}^{\infty} L_k^{d/2-1} (2R^2) e^{-R^2} e^{-(2k+\frac{d}{2})\beta} (e^\beta - e^{-\beta})^{d/2}$$

$$e^{R^2 \frac{e^{\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{R^{2m}}{m!} \frac{e^{\omega m \beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^m}$$

$$e^{R^2 \frac{e^{-\omega\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{R^{2n}}{n!} \frac{e^{-\omega n \beta}}{(e^\beta - e^{-\beta})^n}.$$

En mettant $\frac{d}{2} = m + n + 2$, on trouve

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{r}) &= \frac{\hbar}{\pi m} (\vec{k} \wedge \vec{R}) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n+1} (2R^2) e^{-R^2} \frac{R^{2m}}{m!} \frac{R^{2n}}{n!} \\ &\quad \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{[-(2k+m+n+2)+\omega(m-n+1)]\beta} - e^{[-(2k+m+n+2)+\omega(m-n-1)]\beta}}{\beta} \right]\end{aligned}$$

En utilisant la définition (F.10), l'expression finale de la densité de courant devient

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{r}) &= \frac{\hbar}{\pi m} (\vec{k} \wedge \vec{R}) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_k^{m+n+1} (2R^2) e^{-R^2} \frac{R^{2m}}{m!} \frac{R^{2n}}{n!} \\ &\quad \left\{ \Theta\left(\lambda - [2k - \omega + 2 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)]\right) \right. \\ &\quad \left. - \Theta\left(\lambda - [2k + \omega + 2 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)]\right) \right\}.\end{aligned}\tag{F.14}$$

F.4 Calcul de $n(\vec{k})$

La définition de la transformée de Fourier à 2 dimensions de la densité d'une particule $\rho(\vec{r})$ est d'après la référence [101], telle que

$$n(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^2 r.\tag{F.15}$$

De la relation entre la densité et la MDB (voir équation F.9), l'équation (F.15) devient

$$n(\vec{k}) = 2\mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{C(\vec{r}; \beta)}{\beta} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^2 r \right]$$

Sachant que :

$$C(\vec{r}; \beta) = \frac{1}{2\pi \sinh(\beta)} e^{-r^2 (\coth \beta - \frac{\cosh(\omega\beta)}{\sinh \beta})}$$

F.4 Calcul de $n(\vec{k})$

Pour faciliter le calcul on va mettre $g(\beta) = \coth \beta - \frac{\cosh(\omega\beta)}{\sinh \beta}$, donc la densité $n(\vec{k})$ dans l'espace de Fourier devient

$$\begin{aligned} n(\vec{k}) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \frac{e^{-r^2 \cdot g(\beta)}}{\beta \sinh \beta} d^2 r \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{k^2}{4g(\beta)}}}{\beta \sinh \beta} \int e^{-g(\beta)(\vec{r} + i\frac{\vec{k}}{2g(\beta)})^2} d^2 r \right] \end{aligned}$$

En utilisant la relation valable à 2 dimensions

$$\int e^{-ar^2 - i\vec{b} \cdot \vec{r}} = \frac{\pi}{a} e^{-\frac{b^2}{4a}}$$

on déduit que $n(\vec{k})$ s'écrit comme

$$\begin{aligned} n(\vec{k}) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{k^2}{4g(\beta)}}}{\beta \sinh \beta} \frac{\pi}{g(\beta)} \right] \\ &= \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{k^2 \sinh \beta}{4(\cosh \beta - \cosh(\omega\beta))}}}{\beta(\cosh \beta - \cosh(\omega\beta))} \right]. \end{aligned}$$

En utilisant les relations trigonométriques [112] suivantes :

$$\begin{aligned} \cosh(\beta) - \cosh(\omega\beta) &= 2 \sinh(1 + \omega) \frac{\beta}{2} \sinh(1 - \omega) \frac{\beta}{2} \\ \sinh(\beta) &= \sinh((1 + \omega) \frac{\beta}{2} \cosh(1 - \omega) \frac{\beta}{2} + \cosh(1 + \omega) \frac{\beta}{2} \sinh(1 - \omega) \frac{\beta}{2}). \end{aligned}$$

La densité devient

$$\begin{aligned} n(\vec{k}) &= \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{\frac{-k^2 [\sinh(1+\omega) \frac{\beta}{2} \cosh(1-\omega) \frac{\beta}{2} + \cosh(1+\omega) \frac{\beta}{2} \sinh(1-\omega) \frac{\beta}{2}]}{8 \sinh(1+\omega) \frac{\beta}{2} \sinh(1-\omega) \frac{\beta}{2}}}}{2\beta \sinh(1 + \omega) \frac{\beta}{2} \sinh(1 - \omega) \frac{\beta}{2}} \right] \\ &= \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{\frac{-k^2}{8} \coth(1-\omega) \frac{\beta}{2}}}{2\beta \sinh(1 - \omega) \frac{\beta}{2}} \frac{e^{\frac{-k^2}{8} \coth(1+\omega) \frac{\beta}{2}}}{\sinh(1 + \omega) \frac{\beta}{2}} \right] \end{aligned}$$

Pour calculer $n(\vec{k})$ on a besoin d'effectuer une transformation de Laplace inverse en utilisant la relation suivante [107]

$$e^{-A \coth \beta} = \sum_{m=0}^{\infty} L_m(2A) e^{-A} (e^{-2m\beta} - e^{-2(m+1)\beta}).$$

Donc

$$\frac{e^{-A \coth \beta}}{\sinh \beta} = 2 \sum_{m=0}^{\infty} L_m(2A) e^{-A} e^{-(2m+1)\beta},$$

ce qui permet d'écrire $n(\vec{k})$ comme :

$$\begin{aligned} n(\vec{k}) &= \mathcal{L}_\lambda^{-1} \frac{1}{2\beta} \left[2 \sum_{m=0}^{\infty} L_m\left(\frac{k^2}{4}\right) e^{-\frac{k^2}{8}} e^{-(2m+1)(1-\omega)\frac{\beta}{2}} \times 2 \sum_{n=0}^{\infty} L_n\left(\frac{k^2}{4}\right) e^{-\frac{k^2}{8}} e^{-(2n+1)(1+\omega)\frac{\beta}{2}} \right] \\ &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_m\left(\frac{k^2}{4}\right) L_n\left(\frac{k^2}{4}\right) e^{-\frac{k^2}{4}} \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{e^{-[1+m(1-\omega)+n(1+\omega)]\beta}}{\beta} \right]. \end{aligned}$$

En effectuant la transformée de Laplace inverse F.9, on déduit l'expression finale et simple de la densité de particules dans l'espace de Fourier

$$n(\vec{k}) = 2 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_m\left(\frac{k^2}{4}\right) L_n\left(\frac{k^2}{4}\right) e^{-\frac{k^2}{4}} \Theta\left(\lambda - [1 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega)]\right) \quad (\text{F.16})$$

F.5 Calcul du nombre de particules

Dans cette partie, on va calculer le nombre de particules N dans le cas d'un système de fermions piégé dans un potentiel d'OH à 2D, et un champ magnétique \vec{B} suivant l'axe (oz). Dans ce cas l'énergie d'un niveau, solution de l'équation de Schrödinger est telle que [109],

$$\varepsilon_{mn} = 1 + m(1 - \omega) + n(1 + \omega) \leq \lambda$$

qui est toujours inférieure par rapport à l'énergie de Fermi λ , avec

$$\begin{aligned} n_{\max} &= \frac{\lambda - 1}{1 + \omega}. \\ m_{\max} &= \frac{1}{1 - \omega} [\lambda - 1 - n(1 + \omega)]. \end{aligned}$$

Donc le nombre de particules N est tel que

$$\begin{aligned} N &= 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{m=0}^{m_{\max}} 1 \\ &= 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}} (1 + m_{\max}) \\ &= 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}} \left(1 + \frac{1}{1 - \omega} [\lambda - 1 - n(1 + \omega)] \right) \\ &= 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{\lambda - \omega}{1 - \lambda} - 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}} n \frac{1 + \omega}{1 - \omega} \\ &= 2(n_{\max} + 1) \frac{\lambda - 1}{1 - \lambda} - \sum_{n=0}^{n_{\max}} n_{\max} (n_{\max} + 1) \frac{1 + \omega}{1 - \omega} \end{aligned}$$

En remplaçant par l'expression de n_{\max} on trouve finalement

$$N = \frac{\lambda^2 + \lambda(1 - \omega) + \omega - 2\omega^2}{1 - \omega^2} \quad (\text{F.17})$$

F.5 Calcul du nombre de particules

l'équation (F.17) est la même obtenue dans la référence [109].

Il est clair que dans le cas de $\vec{B} = 0$ donc $\omega = 0$, le nombre de particules $N = \lambda^2 + \lambda$, et pour $\lambda = M + 1$, on obtient $N = (M + 1)(M + 2)$. Ce qui est le nombre de particules pour un système de fermions piégé dans un OH.

Bibliographie

- [1] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem*, Springer-Verlag, New York (1980).
- [2] D. R. Hartree ; Proc. Cam. Phil. Soc. 24 (1928) 89.
- [3] V. A. Fock, Zeit. Phys.61 (1930) 89.
- [4] I. Kelson, Phys.Rev. 132 (1963) 2189.
- [5] R. D. Woods and D. S. Saxon, Phys.Rev.**95**, (1954) 577-578.
- [6] K. A. Brueckner. Pys. Rev. **97**, 1353 (1955) 156.
- [7] D. Vautherin, D. M. Brink, Phys. Rev. **C 5** (1972) 626.
- [8] D. Vautherin, Phys. Rev. **C 7** (1973) 296.
- [9] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman, and D. Vautherin, Nucl. Phys. **A203** (1973)433-472.
- [10] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai and P. Quentin. Nucl. Phys. **A238** 1 (1975)29-69.
- [11] H. Krivine, J. Treiner and O. Bohigas, Nucl. Phys. **A336**(1980) 155.
- [12] Ngyuen Van Giai and H. Sagawa, Phys. Lett. **106B**(1981) 379.
- [13] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet and H. -B. Håkansson, Nucl. Phys. **A386** 1 (1982) 79-100.
- [14] F. Tondeur, Phys. Lett. **123B**(1983) 139.
- [15] J. Dobaczewski, H. Flocard and J. Treiner, Nucl. Phys. **A422** (1984) 103-139.
- [16] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, Nucl. Phys. **A627** 4 (1997)710-746.
- [17] M. Bender, P,-H. Heenen et P,-G. Reinard, Rev. Mod. Phys. 75 (2003)1, Page 169.
- [18] D. Gogny. Proceedings of the International Conference on Nuclear Self Consistent Field, Trieste (1975).
- [19] J. Dechargé et D. Gogny, Phys. Rev.**C 21**, (1980) 1568.
- [20] G. F. Bertsch, M. Girod, S. Hilaire, J.-P. Delaroche, H. Goutte and S. Péru. Phys. Rev. Lett. 99(2007)032502.
- [21] T. H. R. Skyrme, Phil. Mag.1, 1043(1956) ; Nucl. Phys. 9 (1959)615
- [22] J. Meyer Ann. Phys. Fr. 28.N°3 (2003).
- [23] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Phys. Rev.**108** (1957)1175.
- [24] A. Bohr, B. R. Mottelson and D. Pines Phys. Rev. 110(1958) 936.
- [25] P. Quentin et J. Bartel , Livre en préparation.

- [26] J. Dobaczewski, lectures in The 18th Jyväskylä Summer School, University of Jyväskylä. August 2008.
- [27] R. E. Peierls and J. Yoccoz. Proc. Phys. Soc. (London) **A70** (1957)381.
- [28] H. D. Zeh. Z. Phys. **188** (1965) 361.
- [29] J. A. Sheikh and P. Ring. Nucl. Phys. **A 665** (2000) 71.
- [30] M. Anguiano, J. L. Egido, and L. M. Robledo. Nucl. Phys. **A696** (2001b) 467.
- [31] N. Pillet, P. Quentin, and J. Libert. Nucl. Phys. **A697** (2002)141-163.
- [32] N. Pillet, Thèse de Doctorat, Université Bordeaux 1 (2000).
- [33] Thuy Long Hà, Thèse de Doctorat, Université Bordeaux 1 (2004).
- [34] P. Quentin, H. Laftchiev, D. Samsøen, I. N. Mikailov, and J. Libert. Nucl. Phys. **A734** (2004)477-480.
- [35] K. Sieja, PhD Thesis, in collaboration between Marie Curie-Sklodowska, Poland University and Bordeaux 1 University (2007).
- [36] L. Bonneau, P. Quentin and K. Sieja, Phys. Rev **C 76**, 014304 (2007).
- [37] D. J. Rowe, *Nuclear Collective Motion, Models and Theory*, Methuen, London (1970).
- [38] A. M. Lane : *Nuclear theory*, W. A. Benjamin, INC (1964).
- [39] M. Baranger and K. Kumar, Nucl. Phys.**62**, 113 (1965).
- [40] L. S. Kisslinger and R. A. Sorensen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **32**, (1960)9.
- [41] P. Quentin, H. Naïdja, L. Bonneau, J. Bartel, H. T. Long. Int. J. Mod. Phys. **E17** (2008) 228-239.
- [42] S. J. Krieger, P. Bonche, H. Flocard, P. Quentin et M. S. Weiss. Nucl. Phys. **A517** (1990)275.
- [43] L. S. Kisslinger and R. A. Sorensen, Reviews of Modern Physics Volume 35, No. 4 (1963) 853.
- [44] S. T. Belyaev, Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Math-Fys. Medd.**31**, No. 11 (1959).
- [45] J. P. Elliot, Proc. Roy. Soc. (London) **A245**, 128 (1958)562.
- [46] D. R. Bes and Z. Szymanski, Nucl. Phys. **28**, 42 (1961)63.
- [47] N. Pillet, J.-F. Berger and M. Girod, Int. J. Mod. Phys. **E15** (2006) 464-470.
- [48] A. Messiah, Mécanique Quantique, Dunos(Paris) (1959).
- [49] J. F. Berger lecture of Fifth Nuclear Theory School, «Symetries in Nuclei» IPHC, Strasbourg (2007).
- [50] K. Sieja, T. L. Ha, P. Quentin and A. Baran. Int. J. Phys. **E16** (2007) 289-207.
- [51] B. N. Parlett and D. S. Scott, Math. Comp., **33**(145), (1979)217.
- [52] C. Lanczös. J. Res. Nat, **B45** (1950) 255.
- [53] M. Bender, G. F. Bertsch and P.-H. Heenen. Nucl-th/0508052 v1 (2005).
- [54] D. E. Medjadi and Ph. Quentin, Nucl. Phys **A441** (1985)291-315.
- [55] S. Schäfer and P. Schuck, Phys. Rev. **B59** (1999-I) 1712-1733.
- [56] G. Colò, Ngyen Van Giai and H. Sagawa, Phys. lett.**B363** (1995)5.
- [57] P.-G. Reinhard, Nucl. Phys.**A649** (1999)305c.
- [58] J. Terasaki, J. Engel, M. Bender, J. Dobaczewski, W. Nazarawicz and M. Stoitsov, Pys. Rev.**C 71** (2005) 034310.

- [59] J. P. Blaizot, D. Gogny and B. Grammaticos, Nucl. Phys. **A265** (1976)315-336.
- [60] J. P. Blaizot, D. Gogny, Nucl. Phys.**A284** (1977)429.
- [61] S. Péru, J. F.Berger and P. F. Bortignon. nucl-th/0506022 v1 (2005).
- [62] S. Péru, H. Goutte and J. F.Berger, Nucl. Phys. **A788** (2007) 44c-49c.
- [63] S. Péru and H. Goutte. Phys. Rev. C77, 044313 (2008).
- [64] D. Vretenar, A. Wandelt, and P. Ring, Phys. lett.**B487** (2000) 334.
- [65] D. Vretenar, N. Paar, P. Ring, and G. A. Lalazissis, Nucl. Phys.**A692** (2001) 496.
- [66] M. K. Pal Theory of nuclear structure, lecture of Theory of nuclear vibration, printed by the IAEA in Austria (1970).
- [67] J. Meyer : Résonances géantes à temprérature finie, Ecole Joliot-Curie (1985).
- [68] E. Khan, M. Grasso, J. Magueron, and Nguyen Van Giai, Nucl. Phys. **A800** (2008) 37-46.
- [69] <http://ipnweb.in2p3.fr/structure/monopolaire.html>.
- [70] M. Goldhaber and E. Teller, Phys. Rev.**74** (1948) 1046.
- [71] B. M. Spicer. Adv. Nucl. Phys. 2, 1.293(1969).
- [72] Ph. Chomaz, Collective excitations in nuclei, École Joliot Curie 1997.
- [73] D. H. Youngblood, J. M. Moos, C. M. Rozsa, J. D. Bronson, A. D. Bacher, and D. R. Brown. Phys. Rev. C13, 3 (1976)994.
- [74] A. Bohr, Mat. Fys. Medd.,26, N°14 (1952); A. Bohr and B. R. Mottelson, Mat. Fys.Medd., 27, .N°16 (1953).
- [75] A. Pitthan and Th. Walcher, Phys. Lett.**318** (1971)563.
- [76] M. B. Lewis and F. E. Bertrand , Nucl. Phys. **A196** (1972)337.
- [77] G. F. Bertsch and R. A. Broglia, Oscillations in Finite Quantum Systems, Cambridge University Press (1994).
- [78] G. R. Satchler. Varenna Lectures 69, 211, 295(1976).
- [79] M. Brack, C. Guet, and H.-B.Håkansson, Phys. Rep.**123** (1985)275.
- [80] G. Giambrone, S. Scheit, F. Barranco, P.F. Bortignon, G. Colò, D. Sarchi, E. Vigezzi. Nucl. Phys.**A726** (2003)3-36.
- [81] D. H. Youngblood, C. M. Rozsa, J. M. Moss, D. R. Brown and J. D. Bronson. Phys. Rev. Lett. **39**, 1188 (1977)296.
- [82] O. Bohigas, A. M. Lane and J. Martorell. Phys. Rep **51**(5), 267-316(1979).
- [83] P. Schuck, Lecture in Proceedings of the College Fundamental Nuclear Physics, International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy, (1984).
- [84] H. Flocard and D. Vautherin, Nucl. Phys. **A264** (1976) 197-220.
- [85] H. Flocard, École Joliot Curie 2002.
- [86] A. Bohr and B. Mottelson, *Nuclear structure*, Benjamin, New York, Volume II (1975).
- [87] D. R. Bes, R. A. Broglia, and B. S. Nilsson, Phys.Rep 16 (1975)1-56.
- [88] E. Caurier and F. Nowacki, Acta. Phys. Pol. **B 30**, (1999) 705-714.
- [89] E. Khan, Nguyen Van Giai, Phys. lett.**B472** (2000)253-257.
- [90] Nguyen Van Giai, P. F. Bortignon, G. Colò, Z. -Y. Ma and M. Quaglia, Nucl. Phys. **A687**(2001) 44c-51c.

- [91] E. Caurier, G. Martinez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves and A. P. Zuker. *Rev. Mod. Phys.* **77** (2005) 427.
- [92] D. H. Youngblood, Y.-W. Lui, and H. L. Clark, *Phys. Rev C* **63**, 067301(2001).
- [93] H. Sagawa, H. Esbensen, *Nucl. Phys A* **693** (2001)448-462.
- [94] N. Paar, P. Papakonstantinou, H. Hergert, and R. Roth, *Phys. Rev. C* **74**, 014318 (2006).
- [95] P. Quentin, Thèse de Doctorat, Université Paris XI (1975).
- [96] B. DeMarco and D. S. Jin, *Science* **285**, 1703 (1999); M. J. Holland, B. DeMarco, and D. S. Jin, *Phys. Rev. A* **61**, 053610 (2000).
- [97] Brandon P. van Zyl, *Phys. Rev A* **68**, 033601(2003).
- [98] Brandon P. van Zyl, Rajat K. Bhaduri, Akira Suzuki and M. Brack, *cond-mat/0209460 v1* (2002).
- [99] M. Brack and Brandon P. van Zyl, *Phys. Rev Lett* **86**, 8(2001)1574.
- [100] M. Brack and M. V. N Murthy *cond-mat/0211156 v2* (2002).
- [101] K. Bencheikh and L. M. Nieto, *J. Phys. A : Math. Theo.* **40**(2007) 13503-13510.
- [102] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, 5th edition. Academic Press, New York, 1994.
- [103] P. Vignolo, A. Minguzzi, M. P. Tosi, *Phys. Rev. A* **64**, 023421 (2001).
- [104] P. Vignolo, A. Minguzzi, M. P. Tosi, *Phys. Rev. Lett* **85** 2850(2000).
- [105] B. P. van Zyl, *cond-mat/9907083* (1999).
- [106] Brandon P. van Zyl and David A. W. Hutchinson, *Phys. Rev B* **69**, 024520 (2004).
- [107] Patrick Shea and Brandon P. van Zyl, *Phys. Rev B* **74**, 205334 (2006).
- [108] Patrick Shea and Brandon P. van Zyl, *J. Phys.A : Math. Theo.* **40** (2007) 10589-10598.
- [109] Patrick Shea and Brandon P. van Zyl, *J. Phys.A : Math. Theo.* **41** (2008)000000-000016.
- [110] N. H. March and M. P. Tosi; *J. Phys. A : Math. Gen.* **18** (1985)L643-L645.
- [111] A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Tome 1, Dunod (1995) Paris.
- [112] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *HandBook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, A Wiley-Interscience Publication (Tenth Printing, December 1972).
- [113] C. Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë *Mécanique Quantique*, Tome 1, Hermann (1977)Paris.
- [114] L. Bonneau, J. Bartel and P. Quentin. *nucl-th/0705.2587v1*, 2007.
- [115] J. Bartel, L. Bonneau, J. Le Bloas, H. Naïdja and P. Quentin, *Proceedings of the 2nd Int. Conf. on Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy* (Publishing Departement of the KINR, Kiev, Ukraine), 2008.

Résumé

Dans le cadre d'une approche Higher Tamm Dancoff Approximation notée HTDA, nous avons étudié les corrélations vibrationnelles de type quadrupole, avec ou sans appariement. Le champ moyen a été déterminé dans le cadre d'une approche microscopique utilisant l'interaction effective de Skyrme. Une interaction résiduelle schématique de type delta plus quadrupole-quadrupole, tenant compte en particulier de l'appariement neutron-proton $T=0$ et $T=1$ a été utilisé. Les résultats obtenus pour la résonance géante quadrupolaire isoscalaire du noyau ^{40}Ca ont été comparés aux données expérimentales et à d'autres résultats théoriques.

Nous avons également étudié un gaz de fermions piégés par un potentiel d'oscillateur harmonique à 2D, et à température nulle, en présence d'un champ magnétique uniforme. Les expressions exactes des quelques grandeurs ont été dérivées à partir de la matrice densité de Bloch.

Mots-clés

champ moyen nucléaire, approche HTDA, corrélations vibrationnelles, appariement neutron-proton, résonance géante quadrupolaire, gaz de fermions dans champ magnétique.

Abstract

Within the framework of the so-called Higher Tamm Dancoff Approximation noted HTDA, we have studied the quadrupole vibrational correlations with or without pairing correlations. In this method the underlying mean field has been determined within a microscopic approach using the Skyrme effective interaction. A schematic residual interaction of the delta plus quadrupole-quadrupole type, allowing in particular neutron-proton $T=0$ and $T=1$ pairing, has been used. The results which have been obtained for the isoscalar quadrupole giant resonance of the ^{40}Ca have been compared with experimental data.

A fermion gas trapped in a 2D harmonic oscillator well at zero temperature and in the presence of a uniform magnetic field has been also investigated. Exact expressions of some quantities have been derived from the Bloch density matrix.

Keywords

nuclear mean field, HTDA approach, vibrational correlations, neutron-proton pairing, giant quadrupole resonance, fermion gas in a magnetic field.